

内 容 提 要

Origin 是美国 OriginLab 公司推出的数据分析和科技作图软件,也是广泛流行和国际科技出版界公认的标准作图工具,功能强大但操作简便,既适合于一般的作图需求,也能够满足复杂的数据分析和图形处理,是科学研究和工程工作者必备的软件之一。

Origin Pro 8.0 是 Origin 软件的最新版本。与以前的版本相比,8.0 版本在电子表格、数据导入和导出、科技作图、数据分析、模块化和自动化操作,以及界面集成等方面都取得了相当大的突破。本书主要按 Origin 基础、数据管理、科技作图、数据分析和自动化编程为系统框架,以模块功能为基础,结合实例,系统地介绍了本软件的使用。

本书适合科研人员、工程技术人员、理工科院校的教师、研究生及本科生工作和学习之用,也可作为自学参考书。

图书在版编目(CIP)数据

Origin8.0 实用教程:科技作图与数据分析/肖信编著.北京:中国电力出版社,2009
ISBN 978-7-5083-8284-5

I. O… II. 肖… III. 数值计算-应用软件, Origin 8.0-教材 IV. O245

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2008)第 210574 号

责任编辑:杜长清

责任校对:崔燕菊

责任印制:郭华清

书 名: Origin 8.0 实用教程——科技作图与数据分析

编 著: 肖 信

出版发行: 中国电力出版社

地址: 北京市三里河路 6 号 邮政编码: 100044

电话: (010) 68362602

传真: (010) 68316497

印 刷: 北京市同江印刷厂

开本尺寸: 185mm × 260mm

印 张: 16.25

字 数: 403 千字

书 号: ISBN 978-7-5083-8284-5

版 次: 2009 年 2 月北京第 1 版

印 次: 2009 年 2 月第 1 次印刷

印 数: 0001—3000 册

定 价: 27.00 元

敬告读者

本书封面贴有防伪标签,加热后中心图案消失

本书如有印装质量问题,我社发行部负责退换

版 权 专 有 翻 印 必 究

如果要求找出一种科研人员、工程技术人员、理工科院校的教师、研究生及本科生都需要使用到的软件，那么除了 Windows 和 Office，很可能就是 Origin 了。Origin 现在的应用已经逐渐扩展到社会科学的相关领域。

Origin 之所以如此广泛地被应用，究其原因主要有两点：首先 Origin 是国际科技出版界公认的标准作图软件，从事理工科的人士如果考虑以图形的方式跨越语言和专业的障碍以实现科研成果的有效交流，Origin 基本上是一种最好的选择。另外，Origin 功能强大但操作简便，易学易用，既适合于一般的作图需求，也能够满足复杂的数据分析、图形处理、函数拟合等高级功能，很好地平衡了功能和操作复杂性的矛盾，因此深受用户欢迎。

笔者使用 Origin 软件超过 10 年，在大学里讲授 Origin 软件也有 5 年的时间，深刻体会到 Origin 软件的对科技工作者和理工科学生的重要性和实用性。然而令人不解的是，作为如此广泛应用的软件，Origin 的教材在国内却非常少，严格地说，一共只有 3 本。而且，就现存的 3 本教材来说，由于教学内容和安排的差异，并不太适合于作为教材使用，笔者一般也只以其作为教学参考书，而根据自己的思路调整后进行授课。

是什么原因造成了这样的现状呢？根据笔者的观察，很多老师和学生都是基于一种临时或具体的需求在使用这个软件。由于理工科的研究领域分得特别细，其需要的图形也就非常的具体，因此虽然大家都知道要用 Origin 软件，但当需要作图时，他们不是选择找一种教材，而是选择请教自己的师兄师姐，当然，这可能是一种最高效的应用方式，但他们一般不会想到如何改进自己的图形效果，并且当使用中遇到新的问题时，也只会尝试对软件摸索一下，如果还不行就选择放弃。另一个重要的原因是：大学里一般不会讲授 Origin 软件的使用。计算机系当然不会讲授 Origin 软件，因为这个软件与他们关系不大；而其他理工科认为 Origin 不属于自己的专业范畴，没有理由开设一门与专业无关的计算机软件课程。至于笔者在大学里的讲授，其实是在一门称为“计算机在××专业中的应用”的课程开设时，教师自己根据学生的需要选用来进行讲授的。因此事实是很奇怪的，Origin 一方面广泛地应用，另一方面基本上不进行讲授。

笔者本无意于改变这种现状，然而当中国电力出版社的编辑提出能否为 Origin 软件再写一本教程时，笔者心动了，因为正是中国电力出版社在 2000 年推出了第一本中文 Origin 教程《Origin 6.0 实例教程》完成了国内 Origin 软件的启蒙教育，写作本书对笔者而言一个重要意义是向前辈致敬。然而，当时 Origin 7.0/7.5 的教材已经有两本，而且 Origin 7.5 已经升级到 SR6，7.5 版已经出现了一些明显的不足之处，必须做更大的改进才行，因此笔者感觉到 8.0 的推出应该为期不远吧。基于这个想法，笔者于 2007 年初开始以 7.5 版为基础为本书写了第 1 稿，

然后静待 8.0 版的发布。然而直到 2007 年 10 月 OriginLab 公司才推出了 Origin8.0, 比笔者估计的速度慢了许多。然后终于有机会见到 8.0 版的真面目, 才发现其相对于 7.5 版的变化实在太多, 第 1 稿的意义已经不大。于是从 2007 年 10 月重新写作, 一直写到 2008 年 5 月才基本完成了第 2 稿, 随后又进行了全面的修订工作, 至此最初的出版计划被大大地推迟了。

对于 Origin 软件的学习, 根据笔者多年的使用和教学的经验, 认为可以分成三大功能模块, 即电子表格和数据管理、科技作图和输出、数据分析和处理, 每部分功能又可以分成若干子模块。分成模块的原因是因为不同的人使用 Origin 的目的不同, 事实上没有必要花大量的时间全面地掌握 Origin 软件。为了提高实用性和学习效率, 可将 Origin 的操作分为基本操作和功能模块两个层次。基本操作是每个人所必须掌握的, 而功能模块可以等到有需要才加以学习。基于以上思路, 本书的写作框架如下: 第一部分为数据管理, 包括第 1 章 Origin 基础和第 2 章电子表格与数据管理; 第二部分为科技作图, 包括第 3 章~第 6 章, 第 3 和第 4 章系统地讨论了二维作图及其设置, 第 5 章讨论了三维作图, 第 6 章讨论了图形的输出和利用; 第三部分为数据分析, 包括第 7 章~第 12 章对应不同的分析功能, 即第 7 章曲线拟合, 第 8 章数学运算, 第 9 章信号处理, 第 10 章光谱分析, 第 11 章统计分析和第 12 章图像处理; 最后一部分为技术扩展, 包括第 13 章编程与自动化。

本书得以出版, 得到了华南师范大学陈炳稔副教授、南俊民教授、袁中直教授、何广平副教授、汪朝阳教授和华南理工大学张伟德教授、王立世教授的大力支持、指导和鼓励。华南师范大学化学与环境学院的领导和同事们为本书的写作给予了有力的支持。在此向以上专家、领导和老师们表达真诚的感谢。还要感谢我的学生唐律、冯美红、邢丽丹和邓成波, 特别是唐律同学, 我在他身上发现了天分、热情和专注。感谢中国电力出版社的领导和编辑给笔者一个机会写作本书并提出了很好的建议, 他们认真细致、一丝不苟的工作精神使本书的质量得以保证。最后要感谢笔者家人对笔者的支持和爱护, 多年来他们付出了很多很多, 但得到的实在很少。

本书是在广泛收集相关资料、多年应用和教学实践的基础上写成的, 笔者希望本书能对所有读者在科技实验数据分析和作图方面有所帮助。由于时间仓促, 水平所限, 书中不免有错漏或不妥之处, 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: g33027675@gmail.com。

肖 信

2008 年 8 月于广州

前 言

第一篇 数 据 管 理

第 1 章 Origin 基础	2
1.1 Origin 概述	2
1.1.1 Origin 简介	2
1.1.2 Origin 8.0 新特性	3
1.1.3 Origin 的系统框架	4
1.1.4 Origin 帮助系统	5
1.1.5 Origin 的安装	6
1.2 Origin 工作环境	8
1.2.1 子窗口	8
1.2.2 菜单栏	11
1.2.3 工具栏	12
1.3 Origin 基本操作	15
1.3.1 子窗口基本操作	15
1.3.2 文件类型	16
1.3.3 命名规则	16
1.3.4 项目管理	17
1.3.5 编程窗口	18
1.4 定制 Origin 软件	19
1.4.1 Text Fonts 选项卡	19
1.4.2 Page 选项卡	20
1.4.3 Miscellaneous 选项卡	21
1.4.4 Excel 选项卡	23
1.4.5 Open/Close 选项卡	24
1.4.6 Numeric Format 选项卡	25
1.4.7 File Locations 选项卡	25
1.4.8 Axis 选项卡	26
1.4.9 Graph 选项卡	27
第 2 章 电子表格与数据管理	29
2.1 电子表格	29
2.1.1 工作簿	30
2.1.2 工作表	31

2.1.3	列操作	34
2.1.4	行编辑	38
2.1.5	单元格操作	38
2.1.6	数据变换	39
2.2	数据导入	40
2.2.1	导入 ASCII 格式	41
2.2.2	导入向导详解	45
2.2.3	数据库格式导入	51
2.2.4	其他格式导入	54
2.2.5	拖放式导入	56
2.3	Excel 集成	57
2.3.1	在 Origin 中使用 Excel	57
2.3.2	整合 Excel 与 Origin 功能	60

第二篇 科技作图

第 3 章	二维作图基础	68
3.1	基本操作	68
3.1.1	基本概念	68
3.1.2	作图操作	69
3.2	图形设置	71
3.2.1	图形设置	71
3.2.2	坐标轴设置	75
3.3	图例和文本	80
3.3.1	图例设置	80
3.3.2	添加文本	81
3.4	多曲线图形	82
第 4 章	二维作图进阶	85
4.1	绘制多层图形	85
4.1.1	多层图形实例	85
4.1.2	图层的添加	87
4.2	图层管理	93
4.2.1	调整图层	93
4.2.2	图层的数据管理	94
4.2.3	图层形式的转换	95
4.2.4	链接图层	96
4.3	插入和隐藏图形元素	97
4.3.1	插入图形和数据表	97
4.3.2	隐藏或删除图形元素	98
4.4	图形工具	99
4.4.1	使用 Graph 工具栏	99
4.4.2	使用 Tools 工具栏	100
4.4.3	使用 Mask 工具栏	101
4.4.4	对象管理	103

4.5	各类二维图形简介	104
4.5.1	函数作图	104
4.5.2	其他二维图形	104
第5章	三维图形绘制	111
5.1	矩阵数据窗口	111
5.1.1	创建 Matrix 窗口	111
5.1.2	Set Properties 属性	111
5.1.3	Set Dimensions 规格	112
5.1.4	Set Values 设值	112
5.1.5	Matrix 窗口常用操作	113
5.2	三维数据转换	115
5.2.1	将 Worksheet 转换为 Matrix (Direct 方法)	116
5.2.2	扩展 Matrix (Expand 方法)	116
5.2.3	XYZ Gridding (网格化)	117
5.3	三维作图	118
5.3.1	从矩阵窗口建立三维图形	118
5.3.2	通过数据转换建立三维图形	120
5.3.3	三维图形设置	121
5.3.4	三维图形旋转	122
5.4	三维图形类型介绍	122
5.4.1	3D XYY Graph	122
5.4.2	3D XYZ Graph	124
5.4.3	等高线图	125
5.4.4	3D Surface	126
5.4.5	Image	127
第6章	图形的输出和利用	128
6.1	与其他软件共享	128
6.1.1	通过剪贴板利用数据	129
6.1.2	创建并插入新的 Origin 图形对象	130
6.1.3	使用嵌入式图表	130
6.1.4	使用链接式对象	131
6.2	图形输出	132
6.2.1	图形输出基础	132
6.2.2	图形格式选择	133
6.3	Layout 窗口	134
6.4	论文出版图形输出技巧	138
6.5	图形打印	138

第三篇 数据分析

第7章	曲线拟合	141
7.1	回归分析概述	142
7.1.1	什么是回归分析	142
7.1.2	回归分析的分类	143

7.1.3	回归分析的过程	144
7.2	线性拟合	144
7.2.1	线性拟合实例	144
7.2.2	拟合参数的设置	146
7.2.3	拟合结果的分析报表	148
7.2.4	关于分析报表	150
7.2.5	报表基本操作	151
7.2.6	报表中的图形编辑	151
7.2.7	多元线性回归	152
7.2.8	多项式回归	153
7.3	非线性拟合	154
7.3.1	基本过程	154
7.3.2	NonLinear Fitting 对话框详解	155
7.3.3	自定义函数拟合	160
7.3.4	Nonlinear Surface Fit、Fit Single Peak、Fit Exponential、Fit Sigmoidal	163
7.3.5	Fit Multi-peak	163
7.3.6	Simulate Curve	164
第 8 章	数学运算	165
8.1	数学运算概述	165
8.2	数据运算实例	166
8.2.1	Interpolate/Extrapolate Y from X... 插值/外推求 Y 值	166
8.2.2	Trace Interpolation... 趋势插值	167
8.2.3	Interpolate/Extrapolate... 插值/外推	168
8.2.4	3D Interpolation... 3D 插值	169
8.2.5	Simple Math... 简单数学运算	169
8.2.6	Normalize... 规范化/常态化	170
8.2.7	Differentiate... 微分	171
8.2.8	Integrate... 积分	171
8.2.9	Average Multiple Curves... 平均多条曲线	172
8.2.10	Subtract Straight Line、Subtract Reference Data 扣除数据	172
8.2.11	Vertical Translate、Horizontal Translate 平移曲线	173
第 9 章	信号处理	175
9.1	信号处理概述	175
9.1.1	数字信号与信号处理	175
9.1.2	Origin 信号处理	176
9.2	平滑和滤波	176
9.2.1	平滑	176
9.2.2	滤波	178
9.3	傅里叶变换	179
9.3.1	Fast Fourier Transform (FFT) 快速傅里叶变换	179
9.3.2	Inverse Fast Fourier Transform (IFFT) 反向快速傅里叶变换	180
9.3.3	Short-Time Fourier Transform (STFT) 短时傅里叶变换	181
9.3.4	Convolution 卷积	181
9.3.5	Deconvolution 解卷积	182

9.3.6	Coherence 相干性	183
9.3.7	Correlation 相关性	183
9.3.8	Hilbert Transform 希耳伯特变换	183
9.4	小波变换	184
9.4.1	Continuous Wavelet 连续小波变换	184
9.4.2	Decompose 分解	185
9.4.3	Reconstruction 重建	186
9.4.4	Multi-Scale DWT 多尺度离散小波变换	186
9.4.5	Denoise 除噪	187
9.4.6	Smooth 平滑	187
第 10 章	光谱分析	188
10.1	光谱分析概述	188
10.2	Create Baseline 建立基线	188
10.3	Integrate Multiple Peaks 多峰积分	190
10.4	Baseline and Peaks 基线和峰分析向导	191
10.4.1	Create Baseline 建立基线	191
10.4.2	Subtract Baseline 扣除基线	192
10.4.3	Find Peaks 寻峰	193
10.4.4	Integrate 积分	194
第 11 章	统计分析	195
11.1	统计分析简介	195
11.1.1	什么是统计学	195
11.1.2	Origin 中的统计分析	196
11.2	描述统计	196
11.2.1	准备数据	196
11.2.2	Statistics on Columns 列统计	197
11.2.3	Statistics on Rows 行统计	198
11.2.4	Frequency Counts 频率统计	198
11.2.5	Discrete Frequency 离散频率统计	199
11.2.6	Normality Test 正态检验	200
11.2.7	Correlation Coefficient 相关系数统计	201
11.2.8	2D Frequency Count/Binning 二维频率统计分布图	201
11.3	统计图形	202
11.3.1	数据准备	202
11.3.2	Histogram 直方图	203
11.3.3	Histogram+Probabilities 概率直方图	204
11.3.4	Stacked Histogram 多层直方图	204
11.3.5	Box Chart 方框图	204
11.3.6	QC (X Bar R) Chart 质量控制图	205
11.4	方差分析	206
11.4.1	方差分析 analysis of variance, ANOVA	206
11.4.2	单因素方差分析 One-Way ANOVA	206
11.4.3	双因素方差分析 Two-Way ANOVA	207
11.4.4	重复测量的方差分析 Repeated-measures ANOVA	208

11.5	假设检验	208
11.6	其他分析方法简介	209
11.6.1	非参数检验 nonparametric tests	209
11.6.2	生存分析 Survival Analysis	210
11.6.3	功效和样本大小分析 power and sample size computation	210
11.6.4	受试者工作特性曲线 Receiver Operating Characteristic curves, ROC curves	210
第 12 章	图像处理	211
12.1	数字图像处理概述	211
12.2	图像导入	212
12.3	图像调整	213
12.4	图像转换	214
12.5	几何变换	218
12.6	算术变换	219
12.7	空间滤镜	222
12.8	图像输出	223

第四篇 技术扩展

第 13 章	编程与自动化	226
13.1	LabTalk 脚本语言	226
13.1.1	Command Window	226
13.1.2	执行命令	227
13.1.3	LabTalk 语法	229
13.2	Origin C 语言	234
13.2.1	工作环境	234
13.2.2	Origin C 与其他语言对比	235
13.2.3	Origin C 与 C++	235
13.2.4	Origin C 与 C#	235
13.2.5	语法基础	236
13.2.6	创建 Origin C 程序	236
13.3	X-Functions	237
13.3.1	X-Function 的使用	237
13.3.2	X-Function 的制作	238
13.4	精选程序扩展和插件	240
参考文献	250

Part 1

第一篇

数 据 管 理

本篇内容

- 第1章 Origin 基础
- 第2章 电子表格与数据管理

本章要点

- 软件简介
- 最新特性
- 系统框架
- 工作环境
- 基本操作
- 软件定制

1.1 Origin 概述

1.1.1 Origin 简介

Origin 是 Windows 平台下应用于科技作图和数据分析的软件，由 OriginLab 公司开发，其定位介于专业级和基础级之间，功能强大但操作简便，是广泛流行和国际科技出版界公认的标准作图软件，是科学和工程研究人员必备软件之一。

Origin 开发历史较长（1991—现在），笔者使用的最早版本为 5.0，安装盘为 5 张 1.44MB 的软磁盘，当时还只限于科学工作者之间交流使用。直到 6.0 版本推出，并由中国电力出版社出版了国内第一本介绍 Origin 的书《Origin 6.0 实例教程》，解决了最基本的入门问题，这个软件才开始被国内人士重视和使用。然后是 7.0 版，并很快升级为 7.5 版，这两个版本在数学分析处理模块方面有很大进步，其中，2005 年发布的 7.5 版本进一步集成和统一了风格，使操作更合理和简化，这两个版本也是国内目前被广泛使用的版本。

2007 年 10 月，经过近三年的研发并结合广大用户对 7.5 版本的使用经验，OriginLab 终于推出了 8.0 版，其主界面如图 1.1 所示。就笔者使用 Origin 多年的经验，这个版本的改进还是很值得肯定的。这个版本在系统上进行了较彻底的规划构建，因此无论从处理功能还是从界面集成方面都踏出了重要的一步。当然，操作方式和参数设置也更趋于复杂。

Origin 的每个版本都分成普通版（即 Origin）和专业版（即 Origin Pro），两者的区别是专业版比普通版多了一些数学分析模块，其他功能差别并不大，操作方法和软件界面完全一致，对大部分人来说，采用哪一个版本问题都不太大，本书采用的是 Origin Pro 版本。

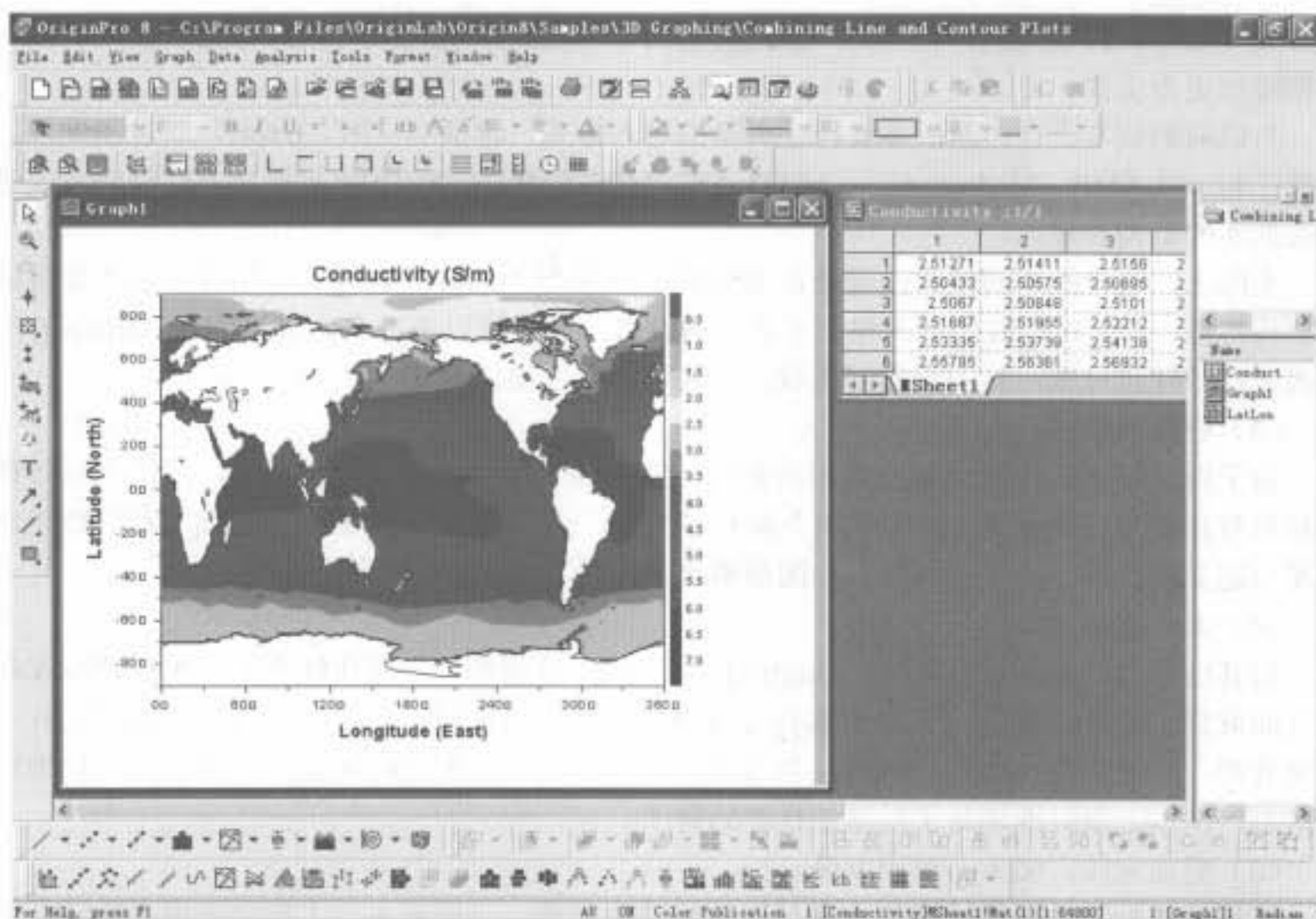


图 1.1 Origin 8.0 界面

1.1.2 Origin 8.0 新特性

(1) 全新的多表工作簿。

在以前的版本中，Origin 的电子表格是其最弱的一环，8.0 版终于彻底地改变了这一部分。新的工作簿特性包括如下几项。

1) 支持多电子表。以工作簿为容器包含多个工作表，组织数据更加方便。

2) 支持多表头。科学数据与普通的二维数据（如典型的 Excel 表）的最大区别是数据具有特定的物理意义，因此必须对每个列进行数据定义，如加以坐标轴和单位等的说明。

3) 单元格支持 RTF 格式。RTF 即所谓富文本（Rich Text），简单来说是一种支持多种混合格式的文本，支持多媒体格式，因此现在可以在任何一个单元格中加入图形、符号、特殊字体、备注、对象等。当然，对于科学作图来说，上下标（用于单位）和符号（如希腊字母）等是最为重要的。

4) 支持最新流行的 Sparklines 功能。这个词目前国内并未见中文翻译，但根据其功能我们可以简单地称之为“简略图”，它以一个图形单元格的形式出现，用于快速预览某列数据的数据趋势（曲线）。

5) 公式的自动计算。也即原始数据发生变化后，运算结果也自动更新（这在 Excel 中是显而易见的），在 Origin 中，这个功能是新增加的。此外还可以利用 LabTalk 和 X-Functions 等功能，使自动化运算的功能进一步提升。

(2) 数据导入功能的改进。

Origin 真正的目的是科技作图和数据分析处理，因为事实上大部分的实验数据是通过其

他方式（如分析仪器监测）获得的，因此数据的导入功能在 Origin 看来比数据表格中的输入数据操作更为重要。

与以前的版本一样，新版本支持了大量的导入格式，包括 ASCII、Excel、二进制文件、数据库和 pCLAMP、Mathematica、MATLAB、MINITAB、LabVIEW 等第三方软件，并改进了数据库的查询和导入。

实际上，这个版本的较大改进是在 ASCII 格式的导入和导入向导上，结合多表工作簿的多表头特性，ASCII 格式的导入得到了真正的改进，而且可以通过自定义过滤器（filters）的方式进行个性化设置，对于大量同类数据的处理非常方便。

（3）作图的改进。

由于以前版本的作图功能已经相当强大，新版除了继续增强作图类型外，改进主要体现在对原有作图类型的分类（组织更加合理）、在图形设置方面提供更加完善的细节和参数控制以及自定义模板和主题等。另外，在图形输出（出版）方面也有所增强。

（4）大大增强的数据分析能力。

与其他大型的数学软件相比，Origin 原有的数据分析能力相对比较有限，不过新版本在这方面取得了较大的进步，支持的重要分析功能包括：线性回归、非线性拟合、数理统计、图像处理、信号处理、光谱处理等，新版本各个模块的功能都已经很强，并且可以方便地进行定制，基本上很好地满足了科学工作者的需求。

（5）更加完善、强大的编程系统。

编程的好处是功能的扩展和大量数据的自动化处理。一般来说，大部分使用者会觉得编程是一个非常高深的工作，通常与自己没有什么关系。说实话，编程当然是不容易的，但也要看软件系统能否把编程的过程进行简化。最典型的是 Word 和 Excel 里的“宏”，其实就是 VBA 编程，但大部分用户使用起来却很方便。

Origin 8.0 在编程自动化方面取得了很大的进展，笔者认为这可能是 8.0 版最核心的改进，实际上这个版本基本实现了整个软件的模块对象化，编程变得非常有价值。

Origin 的编程，以前的版本使用的是 LabTalk 和 Origin C，在新版本中仍然可以使用，但新版本提出了一个 X-Functions 的新框架，结合 Command 窗口，基于功能模块化的思想，能够非常灵活地调用、设置参数和即时重算，或者外部调用 Origin 的所有功能，X-Functions 也可以很容易地进行扩展。

（6）自动保存和备份。

新版本采用了两种机制，包括定时保存和自动备份，用于自动备份项目，以防止数据丢失或出错。

（7）专业版（Origin Pro）的特性。

与普通版相比，专业版增加或增强了一些较高级的分析工具，如统计模型、图形处理、信号处理和 3D 图形拟合等。

总之，与同类软件相比，Origin 只专注于科技作图和实验数据分析，因此在这些方面做得比其他软件都要出色和更易于使用，另外它的可扩展性非常强，能与大多数数学软件包交换数据，新版本则进一步将整个软件系统功能模块化、结构化、自动化和个性化。

1.1.3 Origin 的系统框架

了解 Origin 的系统结构的目的是为了抓住学习主线，便于缩短学习时间，因为 Origin 是

一种不需要完全学会（没有必要全学或不可能全学）就可以顺利解决实际问题的软件。因此作为一个使用者，你首先要确定自己要解决什么问题（达到什么目标），然后才决定要学习什么。

Origin 的系统框架（模块）如图 1.2 所示。

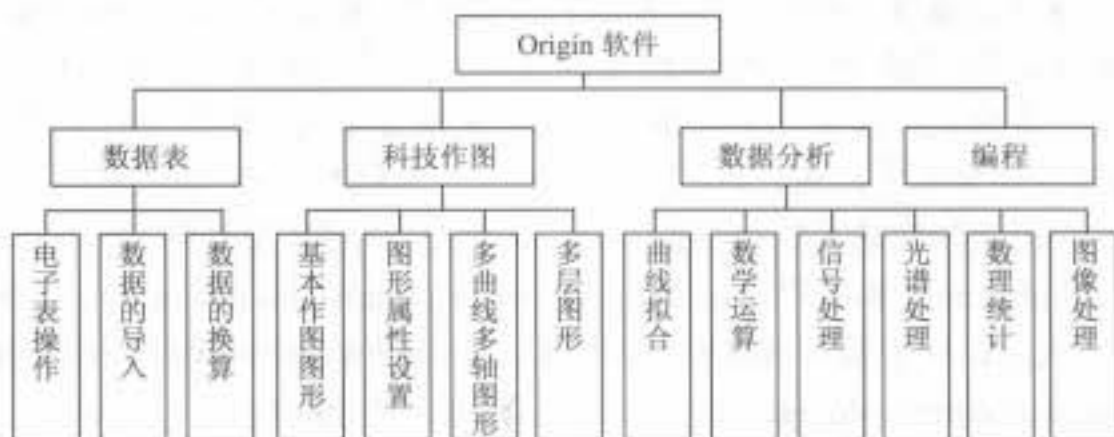


图 1.2 Origin 系统框架

总的来说，数据表（包括数据导入）和简单的二维图形（点线图）的操作（特别是图形属性的设置）是最基本的，其他复杂的二维和三维图形，除非有需要，否则完全可以忽略。对数据分析来说，大部分人需要学习的是线性回归和曲线拟合，涉及光谱的要学习光谱处理（如寻峰、平滑等），物理信号方面要涉及信号处理（如小波算法等），社会科学如教育学和心理学主要涉及数理统计，部分学科可能涉及图像处理，因此要先学基础知识，然后对号入座，无需浪费时间和精力。

1.1.4 Origin 帮助系统

即使拥有一本好的教材，Origin 的帮助系统仍然是很重要的，因为它包含了软件各方面的最详尽的说明（笔者作过统计，这个帮助超过 1400 个页面的内容），因此到了非要仔细研究具体细节时，可能不得不研读这个详尽的英文帮助，如图 1.3 所示。

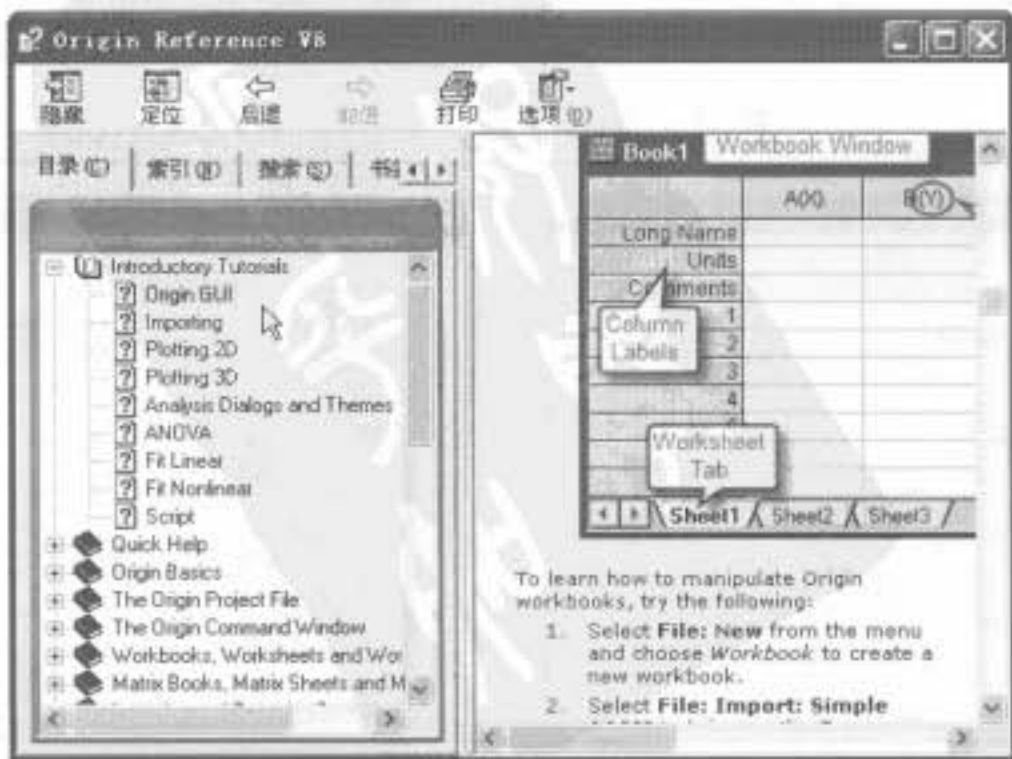


图 1.3 Origin 帮助系统

Origin 的帮助系统包括使用帮助(Origin)、X-函数(X-Functions)帮助、编程(Programming)帮助和教程(Tutorials)四个部分。其中软件帮助是软件的使用说明, X-Functions 帮助和编程帮助则涉及编程和自动化细节方面的说明, 教程包括了 9 个快速入门的综合示例。

有几种方法可以获取软件的帮助: ①单击 Help 菜单的 Origin 命令, 即可打开软件帮助系统, 这个帮助系统已经集成了教程(Tutorials)和部分的 X-函数(X-Functions)帮助内容。②在使用软件时也可随时按 F1 功能键快速进入相关的帮助内容。③利用快速帮助(Quick Help)窗口, 通过在输入关键词, 获取快速帮助(大部分是关于如何实现某项功能的具体指示)。④大部分窗口还带有[?]按钮, 以实现及时帮助。⑤利用 Command 窗口调用帮助。

如果用户在帮助系统中还不能得到足够有用的信息, 则可能要访问 OriginLab 的官方网站(<http://www.originlab.com/>)和用户论坛(<http://www.originlab.com/forum/>)与其他人讨论解决。国内与 Origin 有关的论坛主要有 SimWe 仿真论坛(<http://www.simwe.com/forum/>)和研学论坛(<http://bbs.matwav.com/post/page?bid=70&sty=1&age=0&tpg=1>)。

1.1.5 Origin 的安装

1. Origin 的安装

Origin 提供向导式安装, 操作过程简单。在 Windows 环境下, 将安装盘放入 CD-ROM, 双击 Setup.exe 图标, 根据向导的提示单击 Next 按钮, 输入 Origin 的序列号, 按照向导一步一步向下安装, 最后单击 Finish 按钮完成安装, 如图 1.4 所示。

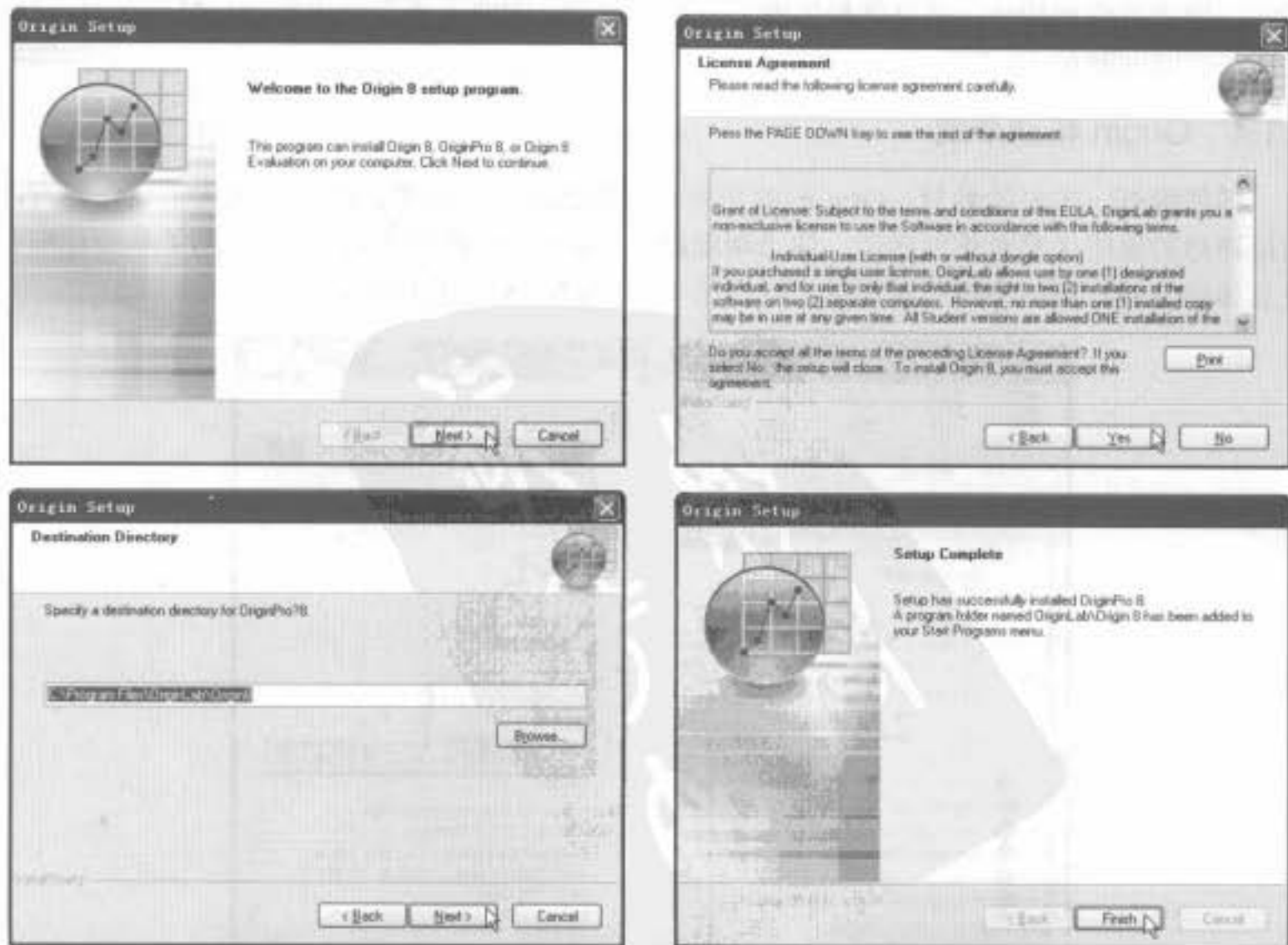


图 1.4 Origin 软件安装界面

完成安装后，第一次运行 Origin 时，系统会花一些时间进行一次初始化过程，主要是编译和加载一些功能。如果用新版本软件打开旧版本（7.5 及以前版本）的 Origin 文件，由于系统框架有所变化，也需要花一些时间进行转换。

2. 卸载 Origin

在 Origin 安装程序项中选择 Origin 8 Add or Remove Files 图标，选择 Remove 按钮，单击 Next 按照向导一步一步操作即可将 Origin8.0 从系统中移除，如图 1.5 所示。

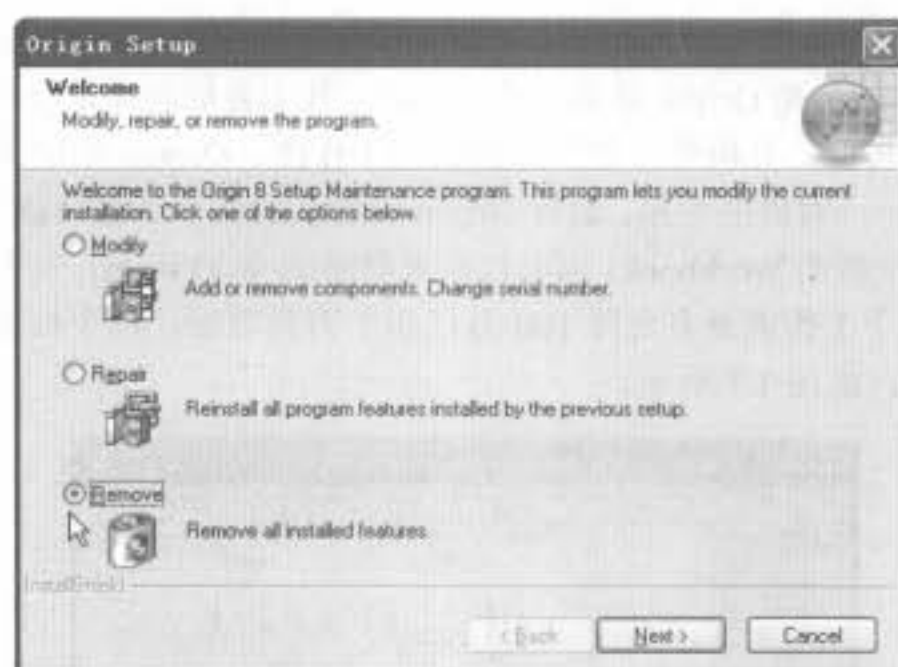


图 1.5 删除或修复 Origin

3. 安装文件说明

在 Origin 8 的默认安装目录为 C:\Program Files\OriginLab\Origin8，其中除主目录放置了系统的主程序外，一些文件夹也要有所了解，如图 1.6 所示。

<div><div>OriginLab</div><div><div>Origin8</div><div>AddOn Setup</div><div>Buttons</div><div>CustomTable</div><div>ePrint</div><div>Filters</div><div>FitFunc</div><div>FLEXlm</div><div>Group</div><div>Inactive</div><div>Localization</div><div>NAG PDFs</div><div>OCTemp</div><div>OriginC</div><div>Palettes</div><div>Samples</div><div>Templates</div><div>Themes</div><div>Tutorial</div><div>Updates</div><div>XFC</div><div>X-Functions</div></div></div>	<div>Origin8: 主目录</div> <div></div> <div>Filters: 各种数据导入格式的模板，可自定义</div> <div></div> <div>Localization: 本地化帮助系统（目前只有英语）</div> <div></div> <div>Origin C: Origin C 的头文件、C 程序</div> <div>Samples: 大量例子（项目文件及数据）</div> <div>Templates: 图形模板</div> <div>Themes: 主题，广义的模板</div> <div>Tutorial: 教程</div> <div>XFC: 共享功能模块（扩展）</div> <div>X-Functions: 功能模块</div>
---	--

图 1.6 Origin 系统安装文件夹与子文件夹

1.2 Origin 工作环境

1.2.1 子窗口

除了 Origin 的主窗口（见图 1.1）外，实际操作过程都是在各种子窗口中进行的，其中最重要的是 Workbooks 数据表窗口（用于导入、组织和变换数据）和 Graph 图形窗口（用于作图和拟合和分析）。

1. Workbooks 窗口

工作簿（Workbooks）是 Origin 最基本的子窗口，其主要的功能是组织和处理数据，包括数据的导入、录入、转换、分析等，最终数据将用于作图。Origin 中的图形除个别特殊情况外，图形与数据具有一一对应的关系。运行 Origin 后看到的第一个窗口就是 Workbooks 窗口。新的 8.0 版本开发了全新的 Workbooks 以取代原来简陋的 Worksheet，一个 Workbooks 支持多达 121 个工作表，每个工作表最多支持 100 万行和 1 万列数据，每个列可以设置合适的数据类型和加以注释说明，如图 1.7 所示。

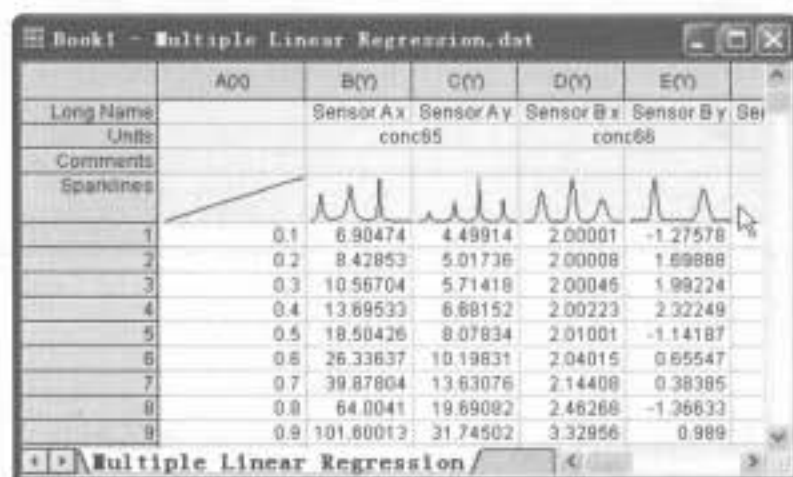


图 1.7 Worksheet 窗口

默认的标题是 Book1，通过右键单击标题栏中选择 Rename 命令可将其重命名。A、B、C 和 D 是数列的名称，X 和 Y 是数列的属性：X 表示该列为自变量，Y 表示该列为因变量，双击数列的标题栏可改变这设置，可以在表头加入名称、单位、备注或其他特性，其中的数据可直接输入，也可以从外部文件导入，或者通过编辑公式换算获得，这些操作将在以后的章节中详细介绍。

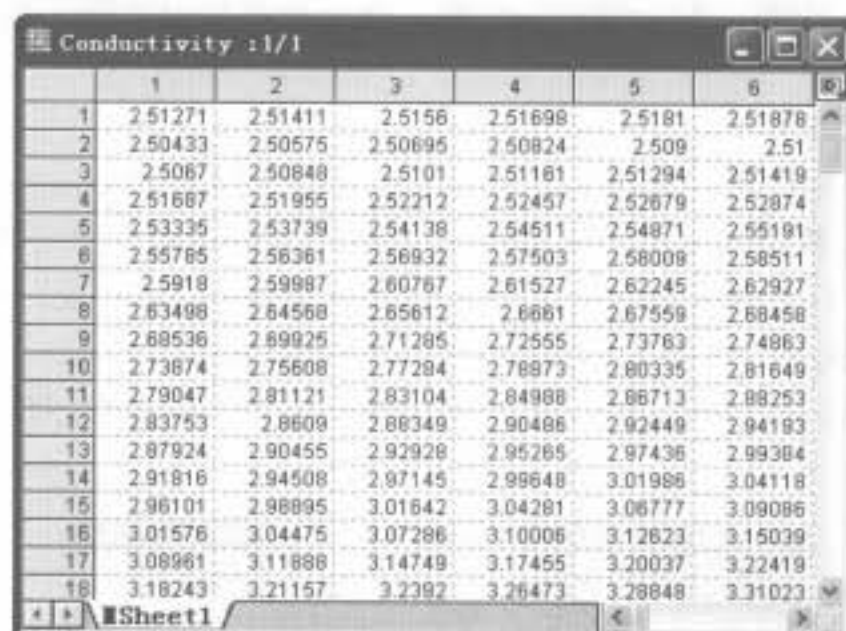
2. Matrix 窗口

Matrix（矩阵）窗口与 Workbooks 窗口外形相似，也是一种用来组织和存放数据的窗口。不同的是，Matrix 只显示 Z 数值（向量），没有显示 X、Y 数值，而是用特定的列和行来表示和 X 和 Y 坐标，常用来绘制等高线、3D 图和三维表面图等。其列标题和行标题分别用对应的数字表示，通过 Matrix 菜单下的命令可以进行矩阵的相关运算，也可以通过矩阵窗口直接输出各种三维图表。在 Origin 中可通过 Worksheet、Excel Workbook 等转换得到对应的 Matrix 数据，或者由第三方软件获得三维数据，如图 1.8 所示。

3. Graph 窗口

Graph 是 Origin 中最重要的窗口，是把实验数据转变成科学图形并进行分析的空间。共有 60 多种作图类型可以选择，以适合不同领域的特殊作图要求，也可以很方便地定制图形模板。一个图形窗口是由一个或多个图层（Layer）组成，默认的图形窗口拥有第 1 个图层，每

个图层可以包含一系列的曲线和坐标轴，此外根据需要可以包含图形对象（对箭头、线段等）。



	1	2	3	4	5	6
1	2.51271	2.51411	2.5156	2.51698	2.5181	2.51878
2	2.50433	2.50575	2.50695	2.50824	2.509	2.51
3	2.5067	2.50848	2.5101	2.51161	2.51294	2.51419
4	2.51667	2.51955	2.52212	2.52457	2.52679	2.52874
5	2.53335	2.53739	2.54138	2.54511	2.54871	2.55191
6	2.55785	2.56361	2.56932	2.57503	2.58008	2.58511
7	2.5918	2.59987	2.60767	2.61527	2.62245	2.62927
8	2.63498	2.64568	2.65612	2.6661	2.67559	2.68458
9	2.69536	2.69925	2.71285	2.72555	2.73783	2.74863
10	2.73874	2.75608	2.77284	2.78873	2.80335	2.81649
11	2.79047	2.81121	2.83104	2.84988	2.86713	2.88253
12	2.83753	2.8608	2.88349	2.90486	2.92449	2.94193
13	2.97924	2.90455	2.92928	2.95265	2.97436	2.99384
14	2.91816	2.94508	2.97145	2.99648	3.01988	3.04118
15	2.96101	2.98895	3.01642	3.04281	3.06777	3.09086
16	3.01576	3.04475	3.07286	3.10006	3.12623	3.15039
17	3.08961	3.11888	3.14749	3.17455	3.20037	3.22419
18	3.18243	3.21157	3.2392	3.26473	3.28848	3.31023

图 1.8 Matrix 窗口

最简单的作图过程是：首先选择 Worksheet（假设数据表中已经有 5 个列的数据），然后选择一种作图类型（直接在工具栏选择或打开 Plot 菜单选择），本例采用 Line+Symbol（点线图），然后在弹出的 Plot Setup 对话框中进行如下设置，即将 X 下的方框选中表示将 A 列定为 X 轴，即自变量，其余列定为 Y 轴，作为因变量，单击 OK 按钮生成图形，如图 1.9 所示。

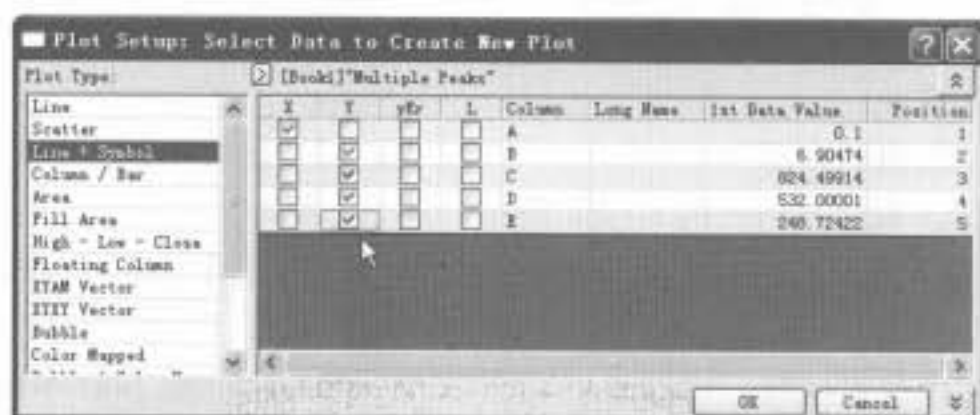


图 1.9 绘图数据设置

由于有一个 X，4 个 Y 的数值。因此得到的图有 4 组曲线，如图 1.10 所示。

Graph 窗口默认名称为 Graph1，同样通过 Rename 命令可进行重命名；右上角的图例说明了曲线与各组数据的相对对应关系；本例中用点线图显示各组曲线，也可以改成其他样式，如 Line（直线）型、Scatter（散点）型等，对点、线的大小、颜色、形状等属性也可重新设定；系统默认只显示左和下两坐标轴，右和上的两坐标轴可在属性对话框中修改使之呈现，通过双击坐标轴上可重新设定刻度大小、间隔、精密度等，坐标轴名称默认为 X/Y Axis Title，双击可进行即时修改。详细的图形编辑、美化将在第 3 和第 4 章中有详细的讨论。

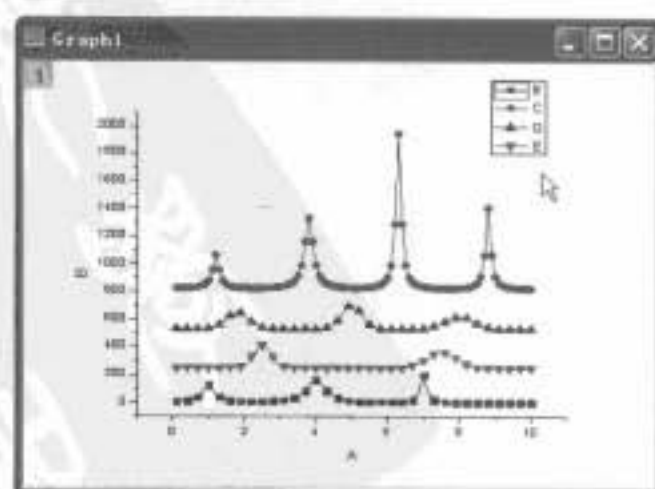


图 1.10 Graph1 窗口

4. Function graphs 窗口

函数作图是 Origin 中唯一的一种无需数据，而是直接利用函数关系的作图方式，具体内容在作图部分再作介绍。

5. Excel Workbook 窗口

由于 Excel 软件应用广泛，使用简便而且函数众多，因此 Origin 软件使用了内嵌的方式提供对 Excel 电子表格数据的支持，在 Origin 中使用 Excel 作图几乎与使用 Origin 自身的 Workbooks 进行作图一样方便。在 Origin 中通过新建或打开 Excel 表，激活 Excel Workbook 后，菜单栏同时出现 Excel 和 Origin 的命令。其中 File、Plot、Window 是 Origin 菜单，其他为 Excel 软件的菜单，因此菜单包括了 Excel 和 Origin 的功能，相关用法将在后面进行详细的讨论，如图 1.11 所示。

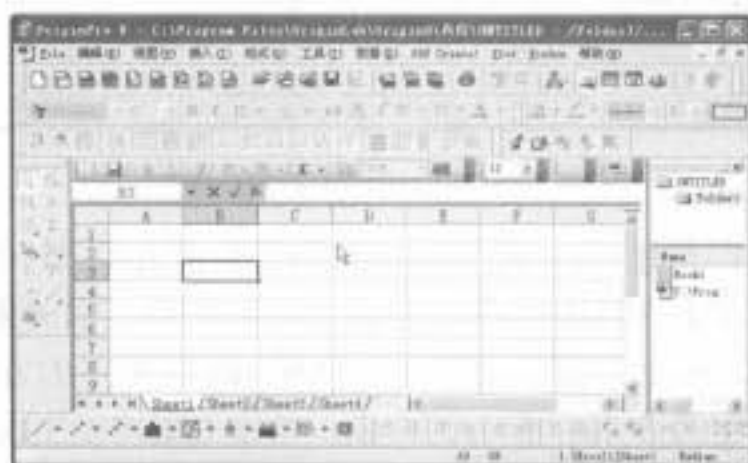


图 1.11 Origin 中的 Excel 窗口

6. Layout Pages 窗口

Layout Pages 用来组织和显示 Worksheet 和 Graph 以方便排版输出。如图 1.12 所示，左边是 Worksheet 数据，右边是所得的 Graph 图形，还有一些相关说明。在 Layout 中只能进行位置的移动或大小等的格式改变，不能进行内容的再编辑，常用于显示局部缩放图形、注释、数据等的混合编排。

Layout Pages 为当前窗口时，通过菜单 Layout → Add Graph 或 Add Worksheet 可将图形、数据表添加到 Layout Pages 中。

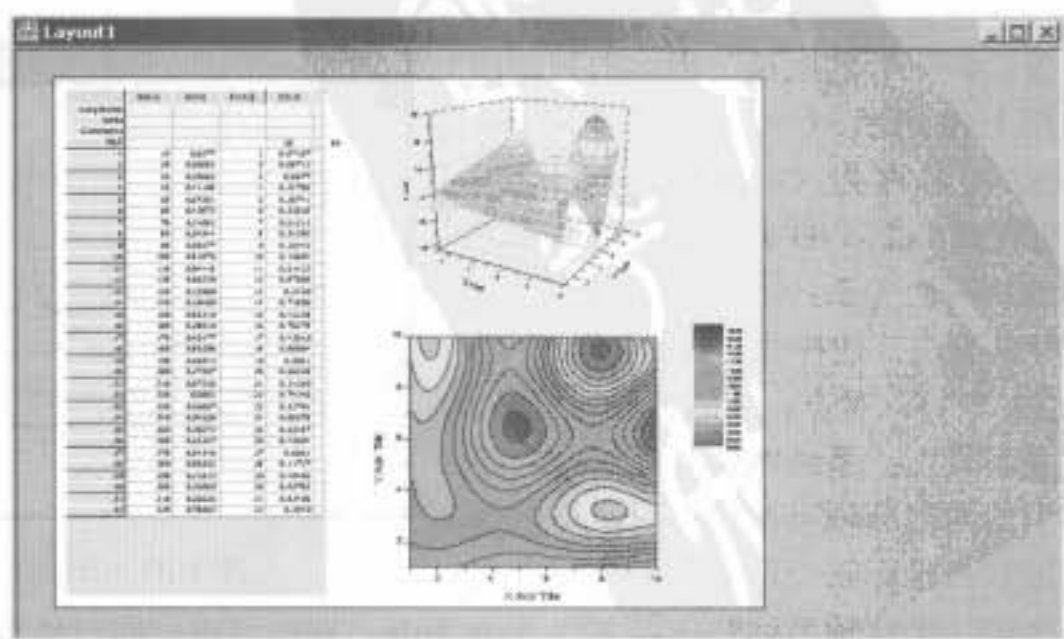


图 1.12 Layout 窗口

7. Note 窗口

Note 供使用者记录相关信息，类似于备忘录记事本，常用于记录图形的绘制过程、图形的相关信息，数据分析结果等，也可以用于数据记录或输入，如图 1.13 所示。

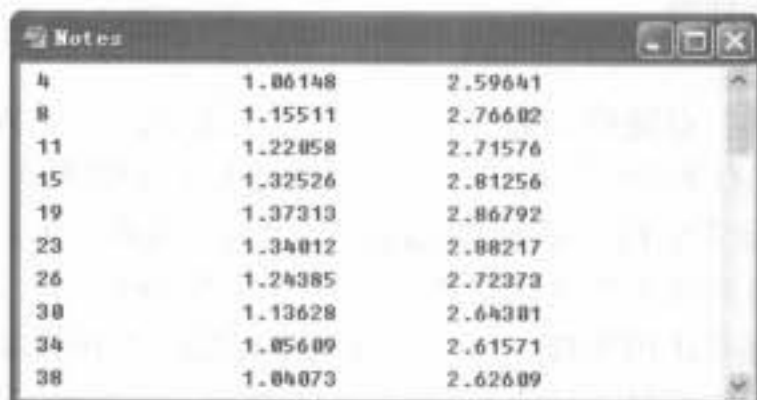


图 1.13 用 Note 文件录入数据

1.2.2 菜单栏

关于菜单首先要留意的是 Origin 所谓的上下文敏感 (Context sensitivity) 菜单，即 Origin 在不同情况下 (如激活不同类型子窗口) 会自动调整菜单 (隐藏或改变菜单项)。这种变化其实是有必要的 (因为操作对象改变了，处理内容和方法当然不同)，但如果没有留意这一点，在操作方面就经常会出现一定的混乱，初学者经常会发现自己找不到特定的菜单项。

(1) 主菜单：对应不同子窗口类型，见表 1.1。

表 1.1 子窗口及其对应的主菜单项

窗口类型	对应的菜单
Workbook	File Edit View Plot Column Worksheet Analysis Statistics Image Tools Format Window Help
Graph	File Edit View Graph Data Analysis Tools Format Window Help
Matrix	File Edit View Plot Matrix Image Analysis Tools Format Window Help
Excel Workbook	File 编辑(E) 视图(V) 插入(I) 格式(O) 工具(T) 数据(D) Plot Window 帮助(H) 当 Excel 窗口为 Origin 当前窗口时，菜单栏同时显示 Excel 和 Origin 的菜单，其中 File、Plot、Window 是 Origin 菜单，其他为 Excel 中的菜单
layout	File Edit View Layout Tools Format Window Help
note	File Edit View Tools Format Window Help

即使菜单的名称相同，对应于不同子窗口类型时，其菜单项目也会发生相应的变化，如对于 Workbook 和 Graph 窗口，都称为 Analysis (分析) 的菜单项分别如图 1.14 所示。



图 1.14 两种 Analysis 菜单对应不同的子窗口类型

8.0 版本广泛采用了 XML 技术, 因此系统会根据用户的操作“智能地”把用户常用的菜单在菜单项主动“推”出来给你, 如图 1.15 所示, 由于用户最近使用过分析菜单中的多项多拟合和平滑两项功能, 这些功能本来是折叠在子菜单中的, 则软件会把菜单项会增加到主菜单项中, 以方便用户再次使用。

(2) 快捷菜单。

快捷菜单即用户用鼠标右键单击某一对象时出现的菜单, 这在 Windows 中被大量使用以加快操作, 在 Origin 中也有大量的快捷菜单(当然也是上下文敏感菜单)。以笔者的经验来说, 在 Origin 中大量使用快捷菜单绝对是明智的选择, 因为不太熟练的使用者经常会找不到具体的菜单命令, 然而快捷菜单几乎总是聪明地提供了你所需要的。

例如, 你用鼠标右键单击图形窗口上, 曲线的坐标轴, 会出现如下快捷菜单, 这个菜单正是你当前可以选择的一些项目(功能), 如图 1.16 所示。

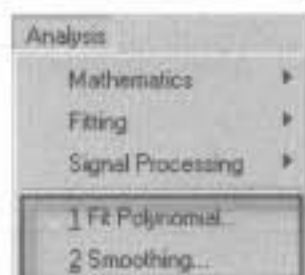


图 1.15 常用菜单项

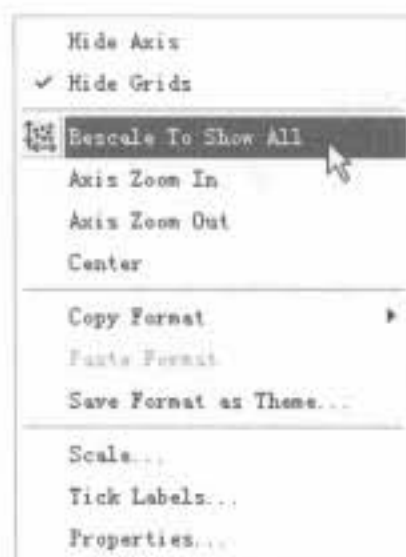


图 1.16 右键快捷菜单

1.2.3 工具栏

与菜单和快捷菜单一样, 工具栏也是为了提供软件功能的快捷方式以便用户使用, Origin 中有各种各样的工具栏, 对应着不同的“功能群”。由于工具栏的数量较多, 如果全部打开会占用太多软件界面空间, 因此通常情况下是根据需要打开或隐藏的。

第一次打开 Origin 时, 界面上已经打开了一些常用的工具栏, 如 Standard、Graph、2D Graph、Tools、Style 和 Format 等, 这些是最基本的工具, 通常是不关闭的。为了打开其他的工具栏, 要通过菜单 View → Toolbars 或者直接按下快捷键 **Ctrl+T** 键进行定制, 通过打勾选择工具栏。选中 Show Tool tip, 则将光标置于某个按钮上时, 将出现此按钮的名称; Flat Toolbars 表示显示平面的按钮; 在 Button Groups 选项卡中, 可以将任意一个按钮拖放到界面上, 从而可以按照所需设定个人风格的工具栏, 如图 1.17 所示。



图 1.17 定制工具栏

如果需要关闭某个工具栏，仍然可以用以上的方法进行定制，当然更简单的方法是单击工具栏上的关闭按钮。另外，Origin 8.0 提供了一个“缩小”而不是关闭工具栏的特殊操作，目的是在保持工具栏存在的情况下，减少工具栏对用户操作界面的影响，如图 1.18 所示。



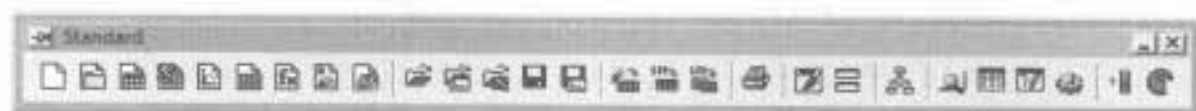
图 1.18 缩小工具栏或面板

工具栏的使用非常简单，只要激活操作对象然后单击工具栏上的相应按钮即可，要注意的是，有些按钮旁边有向下的箭头，表示这是一个按钮组，需要单击箭头然后进行选择。

为了学习方便，下面以功能组为单位介绍 Origin 中的工具栏，当然实际使用时并不需要分组，主要还是以解决问题方便考虑选择适当的工具栏。

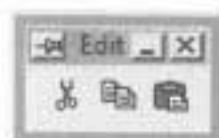
1. 基本组

Standard 工具栏：包括新建、打开、保存、导入、打印等常用操作，以及项目管理等窗口打开按钮，集中了 Origin 中最常用的操作，建议在运行软件时一直保持打开状态。

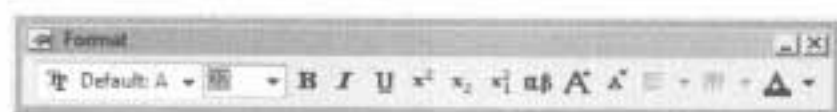


2. 格式化组

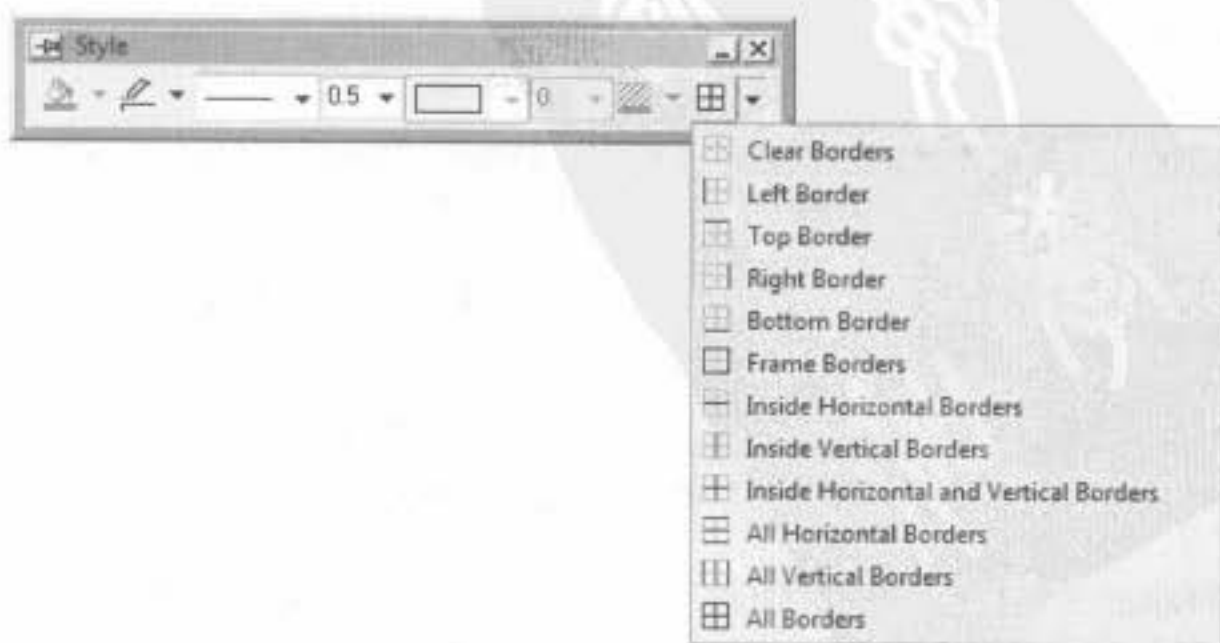
(1) **Edit 工具栏：**主要有剪切、复制、粘贴。



(2) **Format 工具栏：**可以用于进行字体、大小、粗体、斜体、下划线、上下标、希腊字母等的设置，由于 Workbooks 支持 RTF 格式，因此这个工具栏变得较以前版本更加有实际意义。



(3) **Style 工具栏：**提供文本注释包括表格和图形进行填充颜色、线条样式、大小等的样式的设置。



3. 数据表组

(1) Column 工具栏：定义数列为 X/Y/Z 列（变量）、Y 误差列、标签、无关列；将选定数列移到首位、左移、右移、移到末尾等操作。



(2) Worksheet Data 工具栏：可以对 Worksheet 进行一些诸如排序、填入随机数等基本操作。

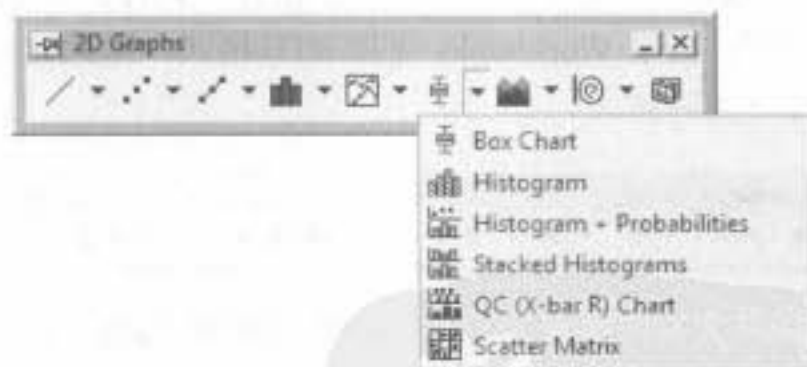


4. 作图组

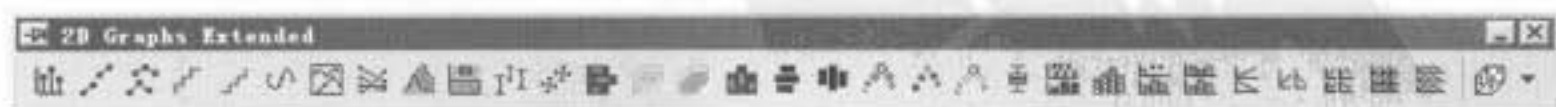
(1) Graph 工具栏：可以将 Graph 或 Layout 页面扩大、缩小、全屏、重新设定坐标值、图层操作，添加颜色、图标、坐标及系统时间等。



(2) 2D Graphs 工具栏：提供最常用的作图类型，可以方便地绘制出各种样式的二维图如直线图、点状图、点线图、饼图、极坐标等。



(3) 2D Graphs Extended 工具栏：它是 2D Graphs 工具栏的扩展，即复杂一些的二维图形，包括绘制线段图、阶梯图、柱状图、棒状图，泡沫图及多层绘图模板等。



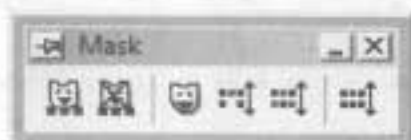
(4) 3D Graphs 工具栏：可用来绘制描点图、抛物线图、带状图、瀑布图、等高线图等三维图形。



(5) 3D Rotate 工具栏：可将绘制好的三维图形进行三维空间操作，包括顺/逆时针，左右/上下旋转、增大/减小透视角度，设定 3D 旋转角度等操作。



(6) Mask 工具栏：用于屏蔽一些打算舍弃的数据点。

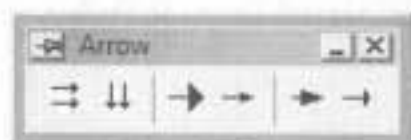


5. 图形对象组

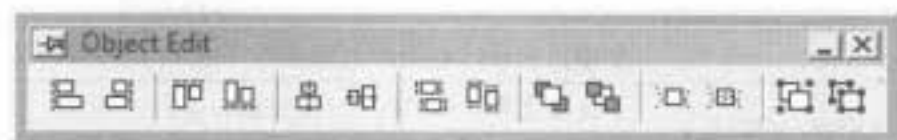
(1) Tools 工具栏：提供缩放、数据选择、区域选择、文字工具、线条工具、矩形工具等。



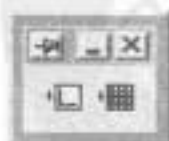
(2) Arrow 工具栏：绘制好箭头后，可用 Arrow 工具栏进行如下操作：箭头水平、垂直排列；箭头加宽、变窄；箭头加长、缩短操作。



(3) Object Edit 工具栏：通常在 Layout 页面中编辑多个对象，可进行多种对齐方式，如左右、上下、垂直、水平对齐；将选定对象置于顶层、底层；组合、取消组合；字体加大或减小等操作，主要是为了排版和多对象关系操作。



(4) Layout 工具栏：利用 Layout 工具栏可以在版面页中分别加入 Graph、Worksheet 窗口的图像。




1.3 Origin 基本操作

1.3.1 子窗口基本操作

Origin 中子窗口的操作包括移动/缩放、隐藏/删除、复制、更新等。

(1) 移动、缩放（改变窗口大小）、最小化、最大化等与一般 Windows 平台的软件的操作方式相同。

(2) 隐藏/删除窗口：单击子窗口的关闭  按钮时，软件提问是隐藏还是删除，由于一个 Origin 项目包含多种窗口，而当前操作窗口只有一个，因此一般情况下是选择隐藏的，除非

真的要删除当前窗口才选择删除。如果不小心删除了数据源，则相关的图形窗口的图形也会被删除，因此删除操作要非常谨慎。关于隐藏窗口的操作也可以项目管理器进行，如图 1.19 所示。

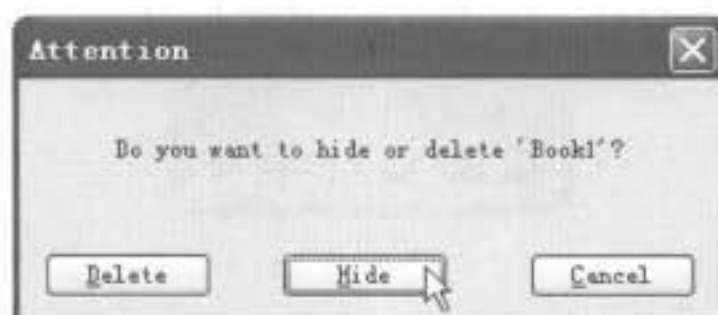




图 1.19 隐藏子窗口

(3) Duplicate 复制窗口：有两种操作可以复制当前窗口，一种是选择 Window: Duplicate 命令，另一种是单击标准工具栏上的  Duplicate 按钮。复制的窗口会自动使命名，命名规则是窗口类型加编号，根据需要可重命名窗口。

(4) 更新窗口：如果数据源或其他内容发生变化，为了正确显示图形，有时候必须手动刷新一下，单击标准工具栏上的  Refresh 按钮完成这个功能。

1.3.2 文件类型

Origin 由于子窗口和操作对象不同，会使用到多种文件类型（对应不同的文件扩展名），有必要加以区别和说明，见表 1.2。

表 1.2 文件扩展名及其意义

文件类型	相应说明
Project Files (OPJ)	主项目文件，包括所有数据、子窗口、脚本、备注等
Child Window Files (OGW, OGG, OGM, TXT)	子窗口文件，OGW：工作簿窗口文件，OGG：图形窗口文件，OGM：矩阵窗口文件，TXT：备注窗口文件。所有子窗口可通过文件菜单单独保存或追加到项目中
Template Files (OTW, OTP, OTM)	模板文件类型：OTW：工作簿窗口模板，OTP：图形窗口模板，OTM：矩阵窗口模板。主要操作：文件菜单中的另存为模板，以及相应的模板库操作
Theme Files (OTH, OIS)	主题模板：类似模板，胜似模板
Import Filter Files (OIF)	数据导入模板
Fitting Function Files (FDF, FIT)	内置和外置，自定义非线性拟合模块，可扩展
LabTalk Script Files (OGS)	编程脚本文件
Origin C Files (.h, .c, etc.)	C 语言文件
X-Function Files (OXF, XFC)	X-函数文件，XFC 为编译的 OXF，可扩展功能模块
Origin Package Files (OPX)	以前版本用 OPK 文件，一种扩展或定制功能，可共享
Initialization Files (INI)	软件用的配置文件
Configuration Files (CNF)	包含 LabTalk 脚本命令、变量参数等

1.3.3 命名规则

Origin 中默认的命名是窗口类型加上编号，由于这些默认名称没有任何意义，因此操作起来不方便，时间长了会忘记，窗口多了会混乱，因此重命名是为这些没有具体含义的名称

加上具体的意义。

不同的子窗口和操作对象的命名规则有所不同，详细讨论还有点复杂。但总的来说其基本规则是：如果是一些备注的说明文字，则其内容和长度要求比较宽松；而对于有可能实际需要操作的对象如子窗口、数据列、单元格等，则有一定的要求。

基本要求包括：

(1) 必须唯一，即不能重复命名。不同子窗口类型（如数据窗口和图形窗口）也不能重复命名。

(2) 一般由字母和数字组成，可以用下划线，但不能包含空格，当然也不能是中文。

(3) 必须以字母开头。

(4) 不能使用特殊符号如! @ # \$ % ^ { } | < > () , ! [] 等。


(5) 长度要适当控制，一般少于十几个字符，不同对象长度限制不同。

对于具体的命名操作，如果命名时违反了规则，Origin 软件会进行适当的提示，这时只要遵守上面的命名规则进行调整即可。

1.3.4 项目管理

对于一个具体的工作，通常用一个项目（Origin Project）文件来组织。因此 Origin 项目文件是一个大容器，包含了一切你所需要的工作簿（工作表和列）、图形、矩阵、备注、Layout、Excel、分析结果、变量、过滤模板等内容。

为了方便管理，Origin 软件把有关的操作集中在项目管理器 Project Explorer (PE) 中进行，这个功能与 Windows 的资源管理器类似。常用的操作如下：

(1) 显示/隐藏项目管理器：打开或关闭项目管理器可单击标准工具栏中的  Project Explorer 按钮或直接按快捷键 ALT + 1，如图 1.20 所示。

(2) 显示/隐形/删除窗口：双击窗口名，第一次会显示该窗口，再一次会隐藏窗口（名称变为灰色）；或者单击鼠标右键，选择 Hide/Show/Delete 命令，如图 1.21 所示。

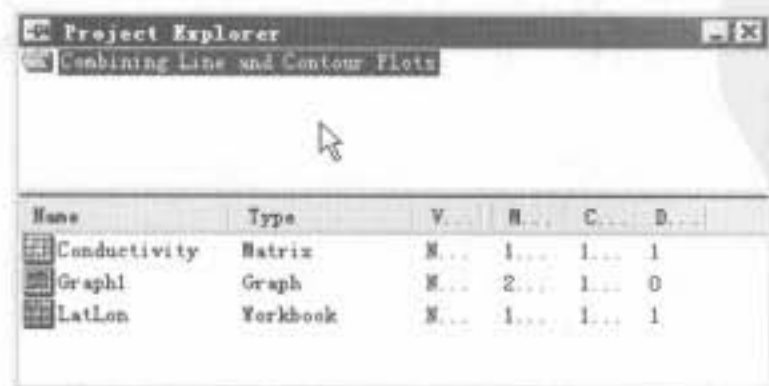


图 1.20 Project Explorer 窗口



图 1.21 Project Explorer 中子窗口操作快捷菜单

(3) 重命名窗口：选择要重命名的子窗口，按鼠标右键选择 Rename，输入正确名称然后按回车键或单击其他对象。

(4) 建立文件（New Window）：在当前文件夹中新建子窗口，这个功能与文件菜单中的 New...命令功能相当，但操作有其方便的地方，如图 1.22 所示。

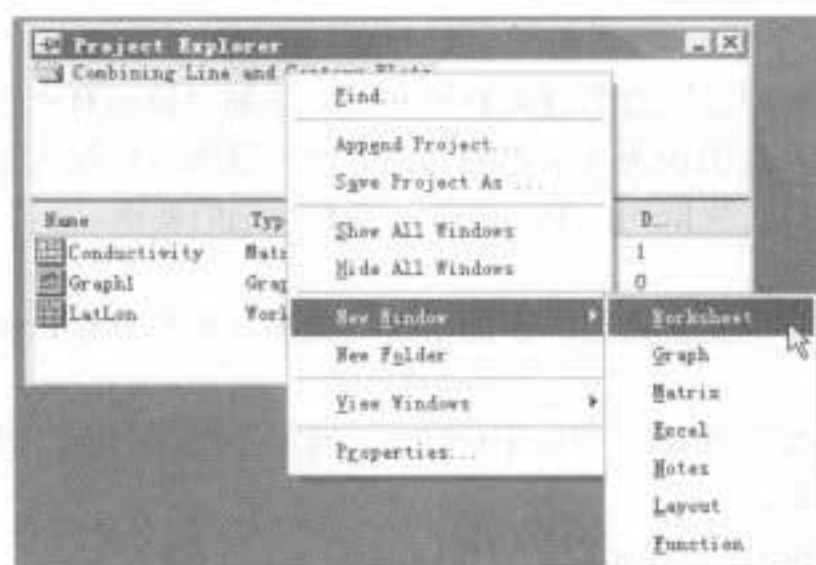


图 1.22 在 Project Explorer 中操作子窗口

(5) 建立文件夹：如果项目中的内容太多，为更好的组织数据，则需要建立多个的文件夹，单击项目文件的主文件夹或子文件夹，在快捷菜单中选择 New Folder 命令，输入名称。新建立的文件夹可以双击进入管理，也可以利用拖放操作重新组织文件。

(6) 查找子窗口：如果子窗口太多，可以利用 Find...命名进行查找。

(7) 保存项目文件：使用文件菜单中的 Save As Project 命令可以保存一份新的项目文件，通常是备份操作。

(8) 追加项目文件：利用文件菜单中的 File: Append 命令或单击鼠标右键使用 Append Project 命令，可以从其他地方加载一些以前保存的子窗口到当前项目中。


1.3.5 编程窗口

1. Command Window: 命令窗口


Command Window (命令窗口) 对应以前版本的 Script Window (脚本窗口)，之所以要改名称，是由于新版本这个窗口的功能大大地增强了。

现在利用这个窗口中，可以通过输入命令行、参数、变量和编程，利用 LabTalk (Origin 设计的一种功能完整的程序脚本语言) 来控制 Origin 软件的一切。实现直接数学计算、数据表数据换算、调用 X-Functions、脚本编程、变量设置等。笔者认为这其实是 8.0 版本中最有突破性的设计。

虽然命令行比图形菜单操作对大部分人来说增加了难度，但学习这个功能绝对是值得的，具体的情况下文还会介绍说明。

可以通过单击工具栏上的  按钮、菜单 View : Command Window 或者直接按下快捷键 Alt+3 将其打开 Command Window。图 1.23 演示了 1~10 的加和运算，其结果为 55。

2. Code Builder 窗口

Origin C 是 Origin 和 OriginPro 内置的程序语言，而 Code Builder (代码编辑器) 用于撰写、编辑和调试 Origin C。可以通过单击工具栏上的  按钮、菜单 View → Code Builder 或直接按下快捷键 Alt+4 键将其打开。

3. Results Log 窗口

Results Log (结果记录窗) 是系统自动记录运行各种操作参数的一些记录文本，如时间、窗口名称、分析类型、分析结果等。8.0 以前的版本中，几乎所有的数据分析结果都是通过

Results Log 窗口输出的，由于新版本采用了 Workbooks 来呈现大部分的数据分析结果，因此 Results Log 窗口没有以前那么重要。


可以通过单击工具栏上的  按钮、菜单 View → Results Log 或者按下快捷键 Alt+2 键重新打开或隐藏。Results Log 只是将客观结果呈现，因此不能进行主观再编辑，单击右键可进行选择、复制或者清空，如图 1.24 所示。



图 1.23 Command 窗口

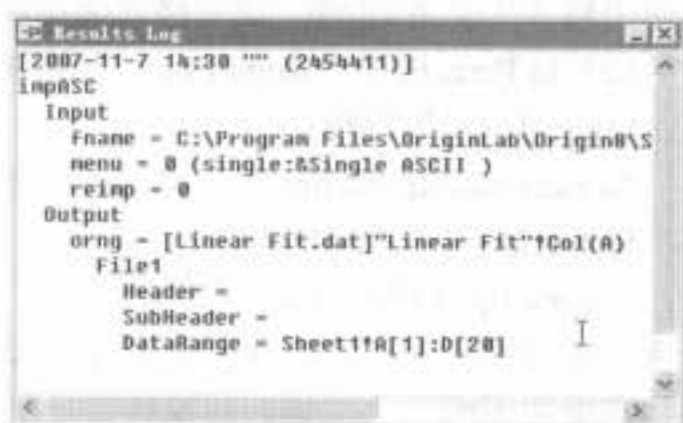


图 1.24 Results Log 窗口

1.4 定制 Origin 软件

设置参数可以方便使用，统一格式，提高工作效率。

说明：本节对于初学者而言并不是必须的，将本部分内容安排在第 1 章主要是因为内容归类更合理，事实上读者可以先学习其他章节后再来学习如何定制 Origin 软件。

选择 Tools → Options 命令即可打开参数设置窗口，如图 1.25 所示。

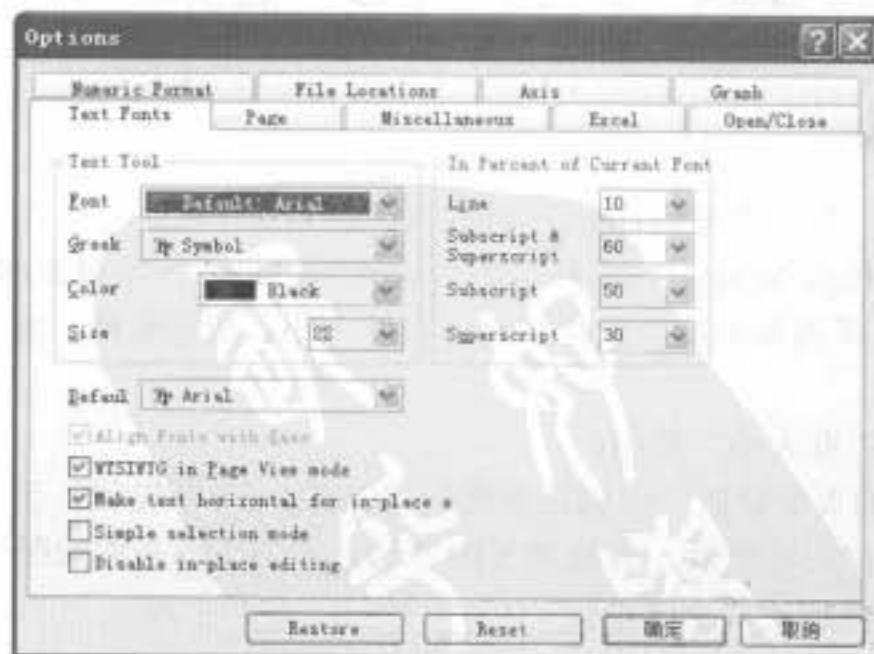


图 1.25 Options 窗口与 Text Fonts 选项卡

最底下的四个公共按钮分别是 Restore（恢复上一次保存的设置）、Reset（恢复默认设置）、确定（提交修改结果）、取消（取消本次修改）。

1.4.1 Text Fonts 选项卡

打开时最先见到的是 Text Fonts 选项卡，用于设置文本格式。

(1) Text Tool。该标签下的选项可以设置:

Font: 字体样式;

Color: 字体颜色;

Size (字体大小)。

另外还有一个 Greek 用于设置希腊字母的字体样式。要使用希腊字母可以在 **T** 工具状态下单击格式工具条的 **αβ**, 这个格式会在你每次创建一个文本框 **T** 时应用。

(2) In Percent of Current Font。该标签下:

Line 用于设置行距;

Subscript&Superscript 用于设置上、下标的字体大小;

Subscript 设置下标的偏移量;

Superscript 设置上标的偏移量。

正如标签所示, 该标签下的数值是以%来计算的, 比如你设置 Line 值为 10, 则行距即为字体高度的 10%。上文说到的偏移量是指文字与上、下标之间的距离。

(3) Default。用于设置显示文本的默认字体。例如你构建一个图形时, 图像会显示对 X、Y 坐标的说明, 图形的 X、Y 坐标说明的文本就使用这个字体。

(4) Align Fonts with Baseline。勾选之后可以使文本中不同字体在同一水平线上。

(5) WYSIWYG in Page View Mode。所见即所得, 作用是在 Page View 状态 (通过 View → Page View 命令进入) 下显示打印到纸上时的效果。

(6) Make Text Horizontal for In-Place Editing。作用是使被旋转过的文本, 在编辑时按照正常的方式水平显示。

(7) Simple Selection mode。表示是否使用普通的选择模式。

(8) Disable In-place Editing。勾选之后, 双击文本时会弹出一个修改文本的对话框; 若没有勾选, 则双击文本时会直接在当前文本中进入编辑模式。

1.4.2 Page 选项卡

页面设置选项卡, 用于设置 Graph 页面输出选项。

(1) Copy/Export Page Settings。该标签用于设置输出页或剪贴对象的格式。

Ratio 可设置输出或剪贴页到其他程序时的页的大小, 以%来算, 如 40 即为原页面大小的 40%。

Margin 是指页的边框大小, 其中:

Border 表示指定的页面边框, 可以在下面的 Clip Border 中设置, 仍以%来计算, 但需要注意的是它指的是 Border 的宽度, 若设置 5 则表示上下左右都会添加图像的 5% 作为边框;

Tight 为包含图像数据的最小区域;

Page 则是指整个页面。

由于软件的差别, 所以输出时可能会存在一些意外的问题, 所以 Origin 设置了 Advanced 选项以修正图形显示, 如图 1.26 所示。

Set Resolution 可以设置 DPI 的值, 一般推荐使用 300, 可以修正大部分的图形;

Keep Size 是保持大小;

Simple 则表示不对图像作修形。

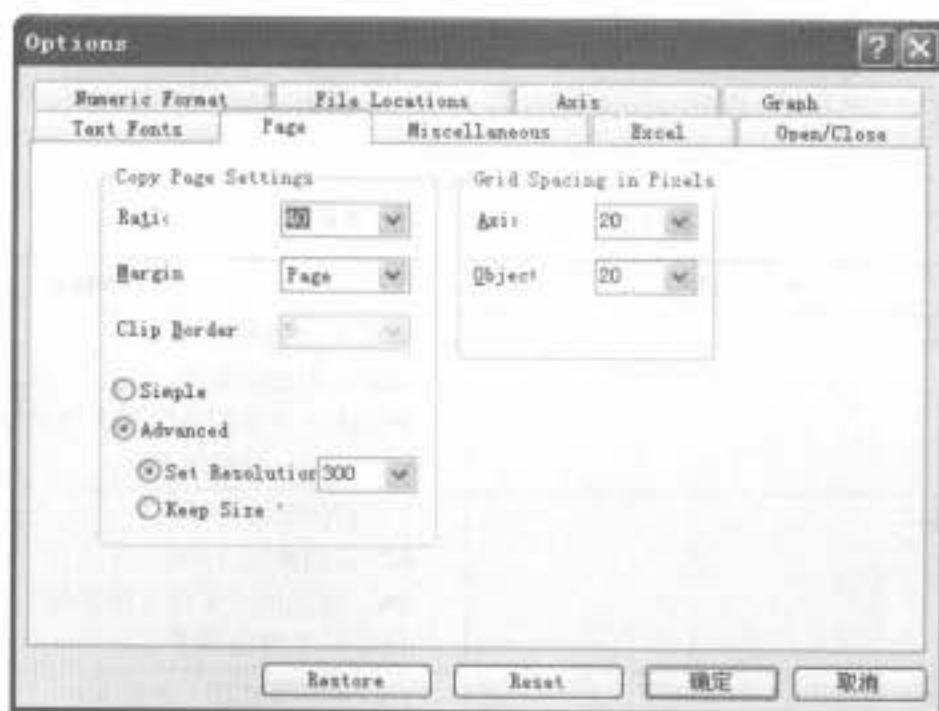


图 1.26 Options 选项卡

(2) Grid Spacing in Pixels。该标签可用来设置网格的大小，其中：

Axis 为轴的网格；

Object 为页的网格，大小以像素算。

要显示网格，可通过 View → Show → Object Grid/Axis Grid 命令来设置。

1.4.3 Miscellaneous 选项卡

该选项卡下的选项都是一些杂项，如图 1.27 所示。

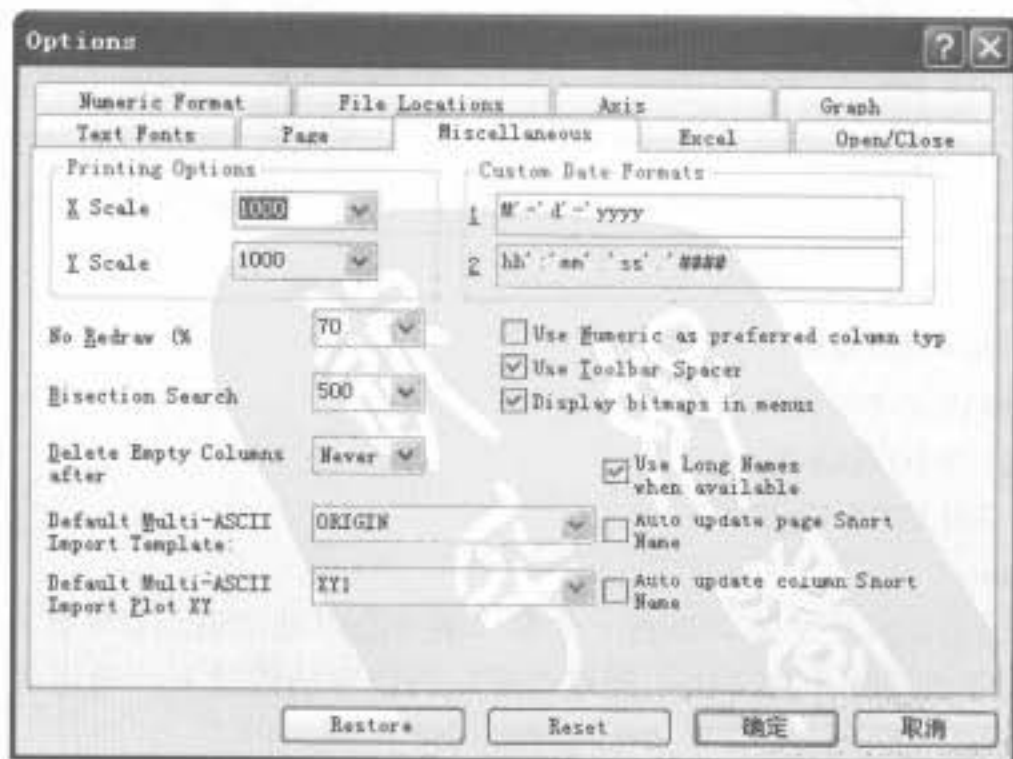


图 1.27 Miscellaneous 选项卡

(1) Printing Options。

用于设置打印页的大小，按‰计算，值为 1000 即是说 X 或 Y 为原页面大小的 1000‰，也就是按原比例打印。

(2) Custom Date Formats.

日期格式的设置，'之间为直接显示的内容，另外有几个字符串表示不同的时间项，其中的意思见表 1.3。

表 1.3 表示时间项的字符串

字 符	时间项	字符串
M	月	M = 月份的数字 MM = 月份的数字 (2 位) 如 1 月为 01 MMM = 月份的英文前 3 个字母 MMMM = 月份的英文
d	日	d = 日的数字 dd = 日的数字 (2 位) ddd = 星期的英文前 3 个字母 dddd = 星期的英文
y	年	y = 年份的最后 1 个数字 yy = 年份的最后 2 个数字 yyyy = 年份
h	时 (按 12 小时显示)	h = 时的数字 hh = 时的数字 (2 位)
H	时 (按 24 小时显示)	H = 时的数字 HH = 时的数字 (2 位)
m	分	m = 分的数字 mm = 分的数字 (2 位)
s	秒	s = 秒的数字 ss = 秒的数字 (2 位)
#	秒的小数位数	# = 1 位小数 ## = 2 位小数 ### = 3 位小数 #### = 4 位小数
t	表示上下午	t = 用 1 个字母 A 或 P 来表示 tt = 用 2 个字母 AM 或 PM 来表示

示例：设当前时间为 2006 年 3 月 7 日 17:34:59.1234

输入 1 y:'dd'-MMMM

输入 2 mm'}'hh'.'###':'ss'='tt

则输出日期为：6:07-March

输出时间为：34}5.123:59=PM

(3) No Redraw.

选中时，当 Origin 内一个窗口被另一个窗口覆盖超过这个值（以%算）时，Origin 不会重画这个窗口，用于防止用户在不甚了解这个窗口的内容的情况下，对这个窗口作出修改。

(4) Bisection Search Points.

选择是否以对分法搜索点的标准，以提高搜索速度。当该值大于图像的点的数目时，则使用连续搜索，否则使用对分法搜索。

(5) Delete Empty Columns After Worksheet Transpose.

选择在变换 Matrix 之后 Always（总是），Never（从不）还是 Prompt（提示）删除空的数列。

(6) Default Multi-ASCII Import Template。

默认的导入多个数据时，用来安放 ASCII 码的容器。

(7) Default Multi-ASCII Import Plot XY。

导入多个数据时的格式：D 表示忽略的列，X 表示导入作为 X 轴，Y 表示导入作为 Y 轴，Z 表示导入作为 Z 轴，E 表示前一个符号表示的列中错误的值，后面跟数字 N 表示把前面 N 列的格式应用到余下的列中去。软件中包含的几种预定的格式为：

XY1：导入数据作为 XY（即第一列为 X 轴，第二列为 Y 轴）或 XYY 或 XXXYYYYYY…；

DX1：导入数据去掉第一列，余下的作为 XY1 格式；

XY：导入数据第一列为 X 轴，第二列为 Y 轴，其余忽略；

XY2：导入数据第一列为 X 轴，第二列为 Y 轴，后面再有数据均按 XY 格式导入；

XYE：导入数据第一列为 X 轴，第二列为 Y 轴，第三列为 Y 轴的错误值，其余忽略；

XYZ：导入数据第一列为 X 轴，第二列为 Y 轴，第三列为 Z 轴。

根据规则，你也可以自己创建导入格式，如：XDYY3：表示导入数据第一列为 X 轴，然后每隔 1 列导入 2 列作为 Y 轴。

(8) Use Numeric as Preferred Column Type。

选择列的内容的类型是数字还是文本，默认为数字。

(9) Use Toolbar Spacer。

它是否显示工具条间隔。

(10) Display Bitmaps in Menus。

它是否在菜单的选项侧边显示选项的图标。

1.4.4 Excel 选项卡

该选项卡关于 Excel 的参数设置，如图 1.28 所示。



图 1.28 Excel 选项卡

(1) The Default Plot Assignments。

选择此项可让选择图像时使用默认的数据表，否则会弹出对话框以选择一个数据表。

(2) Scan Data for Legend。

选择此项可以使 Origin 在数据表缺失数据的情况下建立图像时，在每一列自动向上查找直至找到值为止。

(3) Plot。

选择要绘制多个图像时，绘图的范围是 Single Layer（单个图层），Multiple Layers（多个图层），还是 Multiple Pages（多页）。

(4) The Opening Excel Files。

是否在打开 Excel 表格时提示操作。

(5) Saving Excel。

选择保存 Excel 时在什么情况下发出提示操作：Never（从不），Before Saving（保存）或是 Before Saving Project As（保存为）。

1.4.5 Open/Close 选项卡

这个选项卡是一些进行打开或关闭操作时的参数，如图 1.29 所示。



图 1.29 Open/Close 选项卡

(1) Window Closing Options。

该标签下都是一些关闭窗口时是否提示的选项，另外 Prompt for Save on Script Window Close 可以选择在用 Script 进行关闭数据表操作时是否提示。

(2) Start New。

用于设置在打开工程时要显示的图表类型。

(3) Open in Subfolder。

是否在子文件夹打开 Project。

(4) Backup Project Before Saving。

设置是否在保存之前备份文件。

(5) Autosave project every _ minute (s)。

设置自动保存的时间间隔，默认为每 5 分钟自动保存一次。

(6) When Opening Minimized Windows。

选择在打开旧版本的工程时是 Open as hidden (隐藏)、Open as minimized (最小化) 还是 Prompt (提示)。

(7) Prompt for Save on Options Dialog Close。

选择是否在保存参数设置时提示操作。

(8) Save Settings on Close。

是否在关闭 Origin 时自动保存参数设置。

1.4.6 Numeric Format 选项卡

该选项卡可以设置数字格式, 如图 1.30 所示。

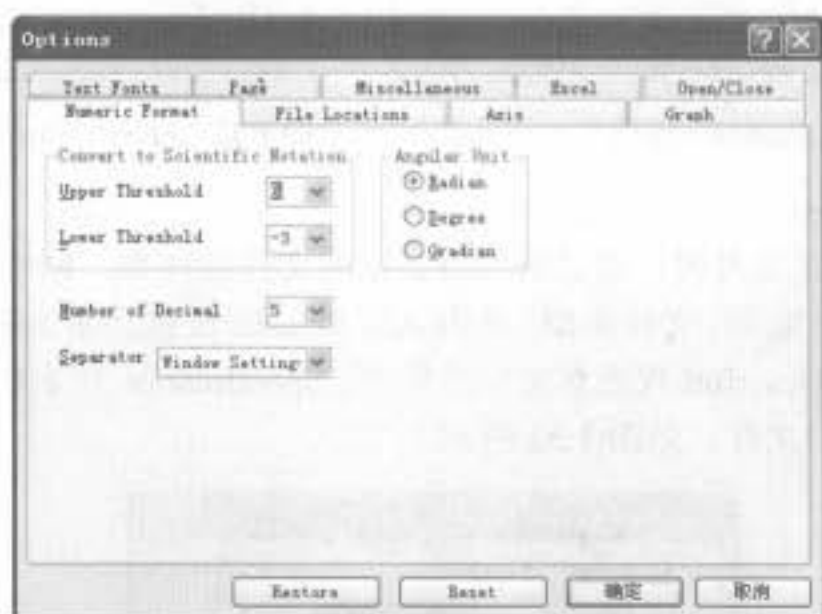


图 1.30 Numeric Format 选项卡

(1) Convert to Scientific Notation。

当数字为科学记数法格式时, 设置指数的数位的上下限。

(2) Number of Decimal Digits。

设置小数位数。

(3) Separators。

选择数字的书写形式是 Windows Settings (系统格式), 还是其他。

(4) Angular Unit。

选择角度的单位是 Radian, Degree 还是 Gradian。

1.4.7 File Locations 选项卡

用于选择打开或保存文件时, 对话框显示的路径。

(1) File Tracking。

选择是否跟踪文件打开或保存时的路径。

(2) File Extension Group Default。

选择不同的 Group (文件类型), 单击 Edit 按钮, 可以打开 File Extension Group Default 对话框。在这个对话框中你可以选择这种 Group 的打开或保存文件时, 默认显示的路径和默认的保存类型 Type。另外勾选 Apply To All Group 选框可以一次性修改所有文件类型, 如图 1.31 和图 1.32 所示。

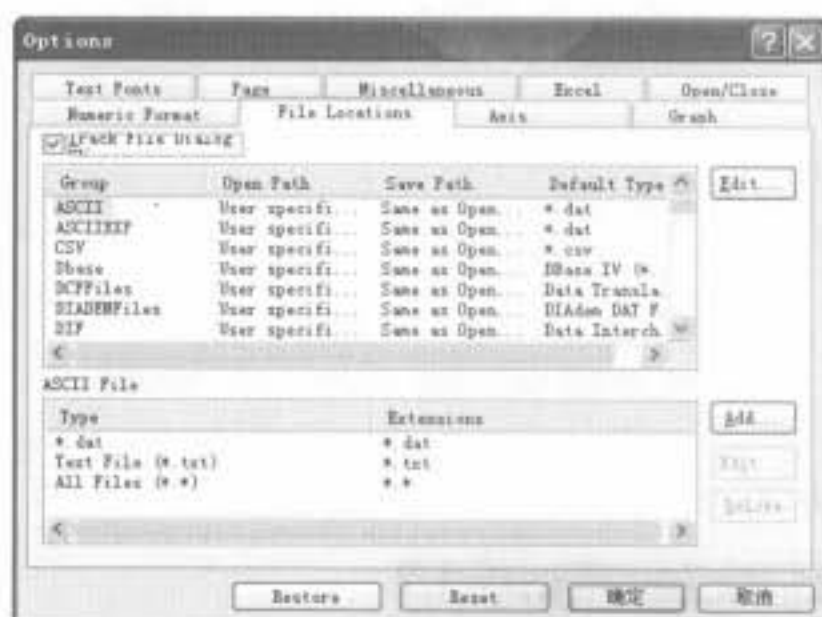


图 1.31 File Locations 选项卡

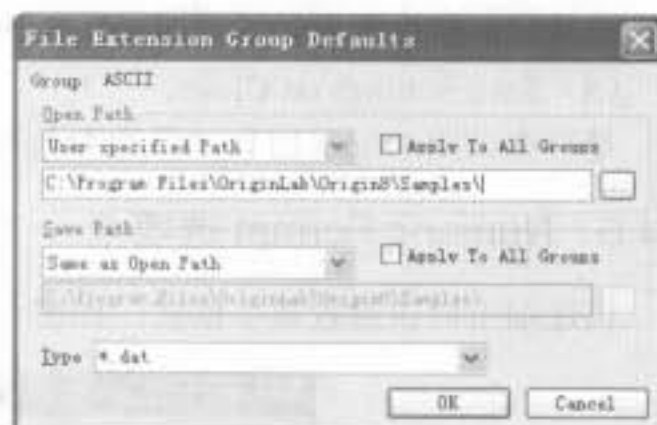


图 1.32 File Extension Group Default 对话框

(3) ASCII File Type.

用于设定导入 ASCII 文件时，对话框可以显示的文件的种类。你可以选择 Add（增加），Edit（编辑）或是 Delete（删除）文件类型。单击 Add 或 Edit 按钮会弹出 File Extension Type 对话框。在这个对话框中 Descripti 代表对文件的描述，Specification 代表该文件的格式，如*.dat 可以接受后缀名为.dat 的文件，如图 1.33 所示。

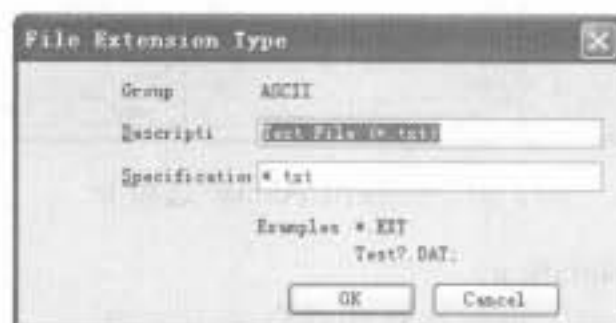


图 1.33 File Extension Type 对话框

1.4.8 Axis 选项卡

该选项卡可以设置坐标轴的格式，如图 1.34 所示。

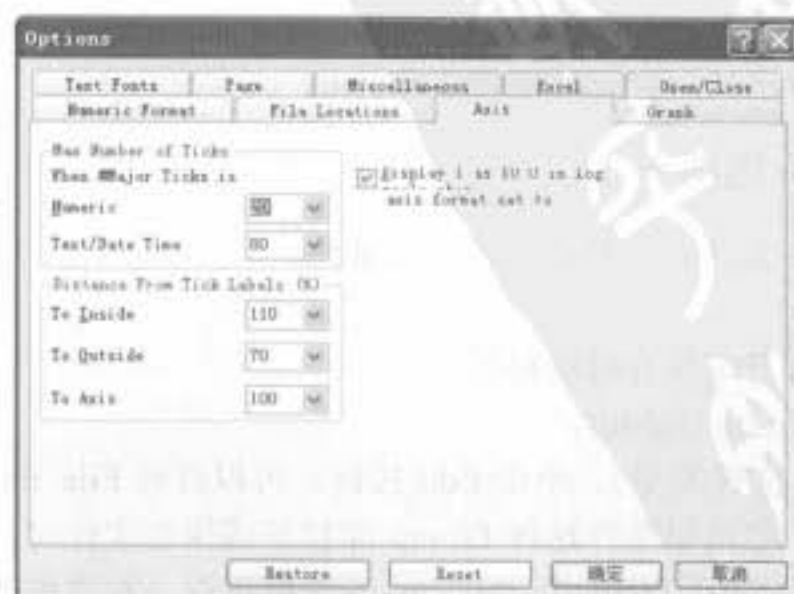


图 1.34 Axis 选项卡

(1) Ma5. Number of Ticks。

其中 Numeric 设置坐标轴主刻度的最大个数, Text/Date Time 设置文本和日期字段的最大长度。

(2) Distance from Tick Labels (%)。

设置当刻度在轴里面 (To Inside) 或是在轴外面 (To Outside) 时, 刻度离轴标签的距离, 和轴标签与轴标题之间的距离 (To Axis Title), 均按%来算。

(3) Display 1 as 10^0 in Log Scale。

当坐标轴以 LogX 为刻度时, 选择此项可以让刻度 1 的标签的显示方式由 1 变为 10^0 。

1.4.9 Graph 选项卡

该选项卡用于设定图像的参数, 如图 1.35 所示。

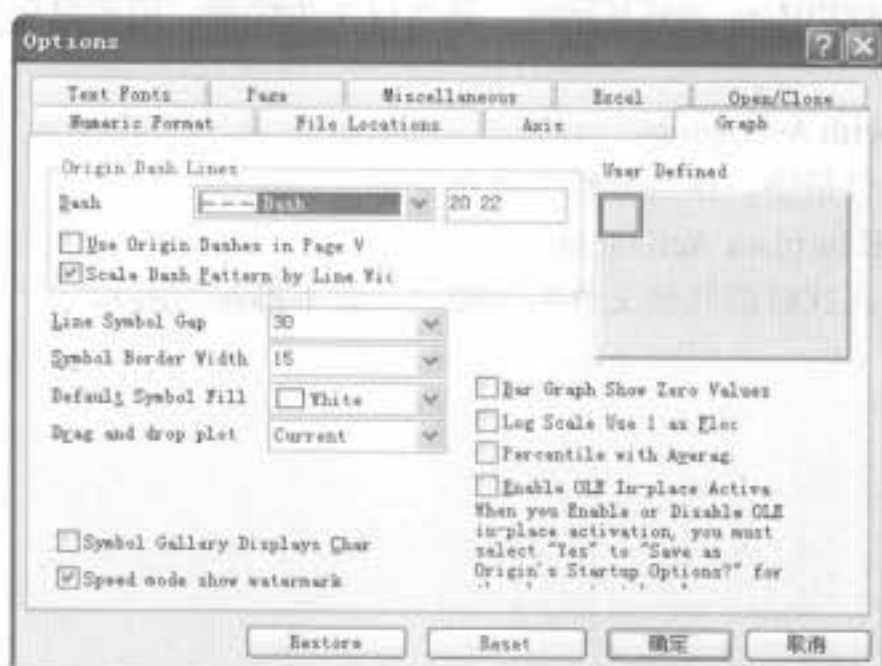


图 1.35 Graph 选项卡

(1) Origin Dash Lines。

该标签下可以设置虚线的格式。Dash 项选择虚线的种类后, 可以在后面设置格式: 按线—空格—线—空格…所占像素的值依顺序输入即可, 如 12 24 5 13 表示按 [12 个像素长的线-24 个像素长的空格-5 个像素长的线-13 个像素长的空格] 不断重复直至达到虚线长度为止显示虚线。Use Origin Dashes in Page View 可以决定是否在 Page View 模式 (通过 View → Page View 命令进入) 下显示虚线。Scale Dash Pattern by Line Width 可以决定是否依据虚线后的空隙按比例缩放虚线。

(2) The Line Symbol Gap (%)。

用于设定在 Line+Symbol (电线图) 图像中点与线之间的距离, 按点的百分比来计算。

(3) Symbol Border Width (%)。

用于设定图像中点的方框大小, 按点的百分比来计算。

(4) Default Symbol Fill Color。

用于默认的点的颜色。

(5) Drag and Drop Plot。

用于设定拖动图形时的样式。

(6) Symbol Gallery Displays Characters.

用于设定在设定数据点样式时(通过 Format → Plot → Symbol 命令进入)是否可选字体。

(7) Speed mode show watermark.

选择是否在 Speed mode 下显示水印。

(8) User defined.

自定义图标。Ctrl+X 为删除, Ctrl+C 为复制, Ctrl+V 为粘贴。你可以先把图标复制到剪贴板上在贴到这里来。这些图标可以用来表示数据点(通过 Format → Plot → Symbol 命令使用图标)。

(9) Bar Graph Show Zero Values.

选择是否在图像的 Y=0 处显示一条线。

(10) Log Scale Use 1 as Floor.

选择在坐标轴刻度以 Log 方式显示时, 是否以 1 为底数, 用于对数值小于 1 时的柱型数据图中。

(11) Percentile with Averaging.

选择是否在统计分析中, 使百分数的分布平滑。

(12) Enable OLE In-place Activation.

选择是否激活嵌入式修改其他文件的功能(一般不推荐使用)。



本章要点

- 工作表操作
- 数据列操作
- 数据的导入
- 数据的转换
- Excel 集成

数据是作图的基础和起点，本节内容涉及数据的录入、数据的导入、数据的变换、数据的管理等，本章是 Origin 软件最基础和必须掌握的内容。

2.1 电子表格

电子表格的结构主线（框架关系）如下：

项目（Project）>>工作簿（Workbook）>>工作表（Worksheet）>>列（Column）>>单元格（Cell）

与以前版本相比，新版本电子表格部分进行了全面的改进，核心变化包括：①支持多表；②支持多表头；③单元格支持 RTF 格式。

Origin 中用于管理数据的容器称为工作簿（Workbook），每个工作簿包含最多 121 个工作表（Worksheet），工作表是真正存放数据的二维数据表格（DtatGrid）。由于每个项目（Project）包含的工作簿数量是没有限制的，因此可以在一个项目中管理数量巨大的实验数据。

工作簿或工作表与 Excel 等电子表格软件（Spreadsheet）看起来好像很相似，实际上存在着明显的区别：电子表格的行与列之间可以没有任何逻辑关系，因此其操作对象是基于单元格或若干个单元格的，而 Origin 所期望的数据是具有特定物理意义的科学数据。

这种意义对于列来说，首先究竟是自变量（X，作为 X 轴坐标）还是因变量（Y，作为 Y 轴坐标）还是三维变量（Z，第三维坐标）。其次 X 变量代表的是什么具体物理的意义，如典型的是时间、浓度、温度、pH 值等等，Y 变量代表的又是哪一种物理量随 X 变量而变化呢？如 pH 值随浓度的变化、电导随温度的变化、或者速度随时间的变化等，这些其实是真实实验所赋予的，不能随主观改变。

而对于行来说，这个意义比较简单，就是一组对应着列所表示物理量的实验记录。

因此，如果孤立或人为地把这些实验数据拆开作图和分析，显然是没有道理的。这就是

Origin 的工作簿与 Excel 的电子表最大的区别。不过，由于“电子表格”或者“数据表格”比“工作簿”表达起来意义更加直观清楚，因此本书中仍然会不时使用电子表格这种的说法，但要注意两者的区别。

由于支持多表头和单元格 RTF 格式，每一列的特性变得更加复杂，也更加明了，如图 2.1 所示。

	A(V)	B(V)	C(V)	D(V)
CAS Reg. No.	57.14.7	75.55.0	120.82.1	542.75.6
Compound	1,1-Dimethyl hydrazine	1,2-Propylenimine	1,2,4-Trichlorobenzene	1,3-Dichloropropene
Formula	$C_2H_6N_2$	C_3H_7N	$C_6H_3Cl_3$	$C_3H_4Cl_2$
Structure				
PathLength (m)	2.25	2.25	2.25	2.25
Temp (Deg C)	100	100	100	100
Concentration (ppm)	494.1	500.4	498.4	500.6
Resolution (cm-1)	0.25	0.25	0.25	0.25
Sparklines				
Data Source	056b4anb.spc	144b4ana.spc	158b4anc.spc	056b4anb.spc
Comments	A clear, colorless, flammable,	A fluming, colorless, oily liquid with	A colorless liquid with an aromas	A flammable liquid with faint
1	0.01298	-1.44577E-4	-0.01048	0.0463
2	0.0193	-8.23623E-5	-0.01351	0.04854
3	0.02159	-0.00398	-0.01755	0.04777
4	0.01576	0.00201	-0.01179	0.04738
5	0.01918	-0.00392	-0.01734	0.04385
6	0.01814	-0.00459	-0.01495	0.04713
7	0.01752	-0.00442	-0.01841	0.04599
8	0.01499	-0.00843	-0.01525	0.04540
9	0.01717	-0.00143	-0.01173	0.04543
10	0.00949	-0.00784	-0.01546	0.05075

图 2.1 新版本电子表格示例

2.1.1 工作簿

工作簿的主要操作包括新建、删除、保存、复制、重命名等。

(1) 新建工作簿：有两种常用的方法建立新工作簿，一种是使用 File 文件菜单中的新建 (New...) 命令，然后选择 Workbook，另一种是直接单击标准工具栏上的 New Workbook 按钮，如图 2.2 所示。

(2) 删除工作簿：单击工作簿的关闭按钮，然后选择 Delete 删除。

(3) 保存工作簿：使用文件菜单的窗口另存为 (File: Save Window As) 存为独立的.ogw 文件，如果有必要，也可以保存为模板 (File: Save Template As, 不保存数据只保存设置参数)。

(4) 重命名工作簿：单击工作簿按鼠标右键，选择属性，打开属性对话框，根据具体情况进行命名，其中 Long name 长名，也可以使用中文名称。

(5) 复制工作簿：激活已经存在的工作簿，按住 Ctrl 功能键，用鼠标选中工作表的标签位置然后拖到 Origin 工作空间的空白处放开，则系统会自动建立一个新的工作簿并复制该工作表，如图 2.3 所示。

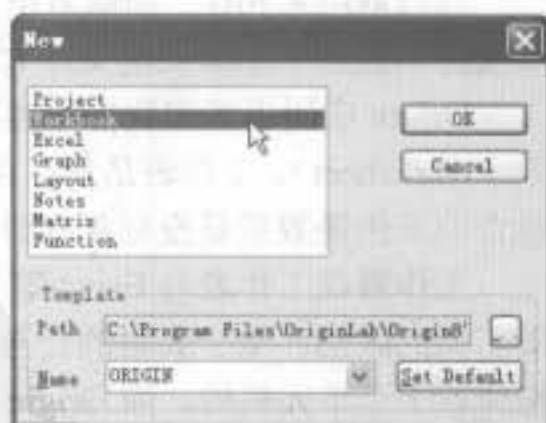


图 2.2 新建工作簿

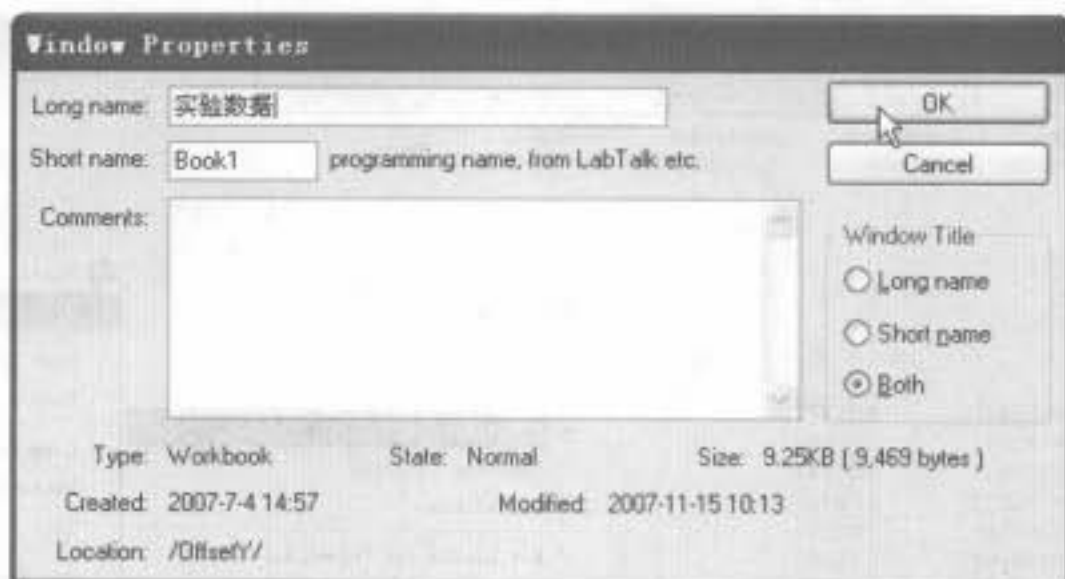


图 2.3 工作簿属性

新建、删除、保存和重命名的操作也可以在项目管理器 Project Explorer 中进行，操作是单击该工作簿或某个文件夹，在鼠标右键快捷菜单中选择相应的功能，具体参见第 1 章相关内容。

2.1.2 工作表

每个工作簿包含一个或一个以上的工作表，一个工作表就是一个二维电子数据表格（但注意行和列具有特定物理意义）。

工作表的操作包括两部分，一部分是以工作表作为一个整体的操作，即工作表的添加、删除、移动、复制、命名等；另一部分是工作表表头的操作和设置。

1. 工作表操作

(1) 在工作簿中添加工作表：单击默认工作表（Sheet1）的标签位置，按鼠标右键，选择 Insert 或 Add 可以添加一个新的工作表，两者的区别是 Insert 插入到当前表前面，Add 则增加到当前表后面，如图 2.4 所示。

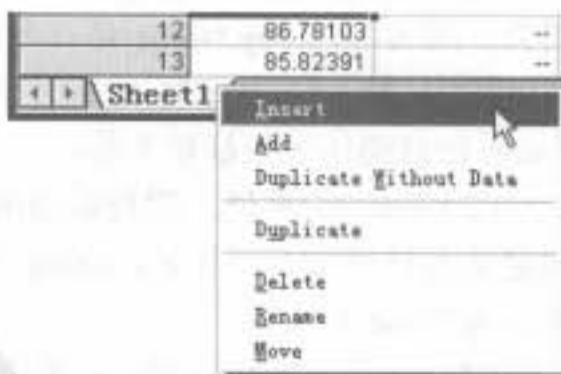


图 2.4 工作表操作快捷菜单

(2) 复制工作表：有两种复制工作表的方式，一种是完整的复制，操作方法同添加类似，但是在快捷菜单中选择 Duplicate。另一种是复制格式但不复制数据，选择 Duplicate Without Data。复制完整表的另一种简单方法是按住 Ctrl 键，单击工作表标签然后用鼠标拖到工作簿的其他空白区域。

(3) 删除/移动/重命名工作表：在快捷菜单中分别选择 Delete/Move/Rename 命令。

(4) 表/列/行的选定：可以选择整个数据表、整行或整列，方法是用鼠标单击数据表左上角空白处、单击列头、单击行号。

2. 工作表表头操作

对多表头的支持是新版本的特性之一，其主要原因是：①赋予数据更明确的意义；②更多的参数说明；③方便自动设定作图时的坐标轴标题和图例；④为了更好地支持来自其他软件和仪器外部数据格式导入的兼容性，设置工作表表头如图 2.5 所示。

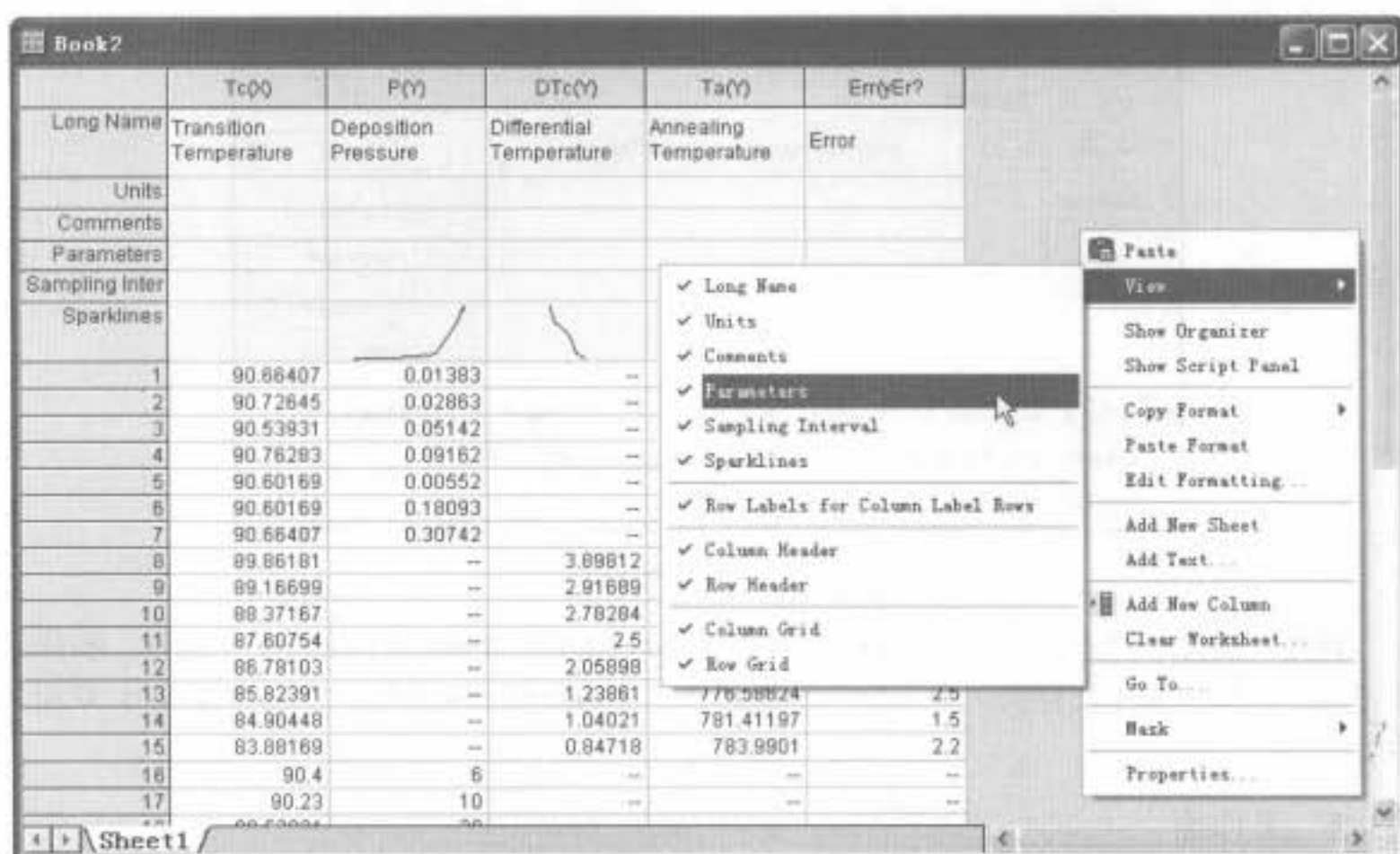


图 2.5 设置工作表表头

用鼠标右键单击工作表空白处或工作表左上角空白，打开快捷菜单，选择 **View** 子菜单，可以打开或关闭工作表各种表头（包括默认和扩展）的显示。默认的表头包括长名（Long Name）、单位（Units）和注释（Comments），扩展的表头包括参数/条件（Parameters）、采样率（Sampling Interval）、简略图（Sparklines）和自定义参数（User-Defined Parameters）。

（1）Long Name：长名。列的名称包括 Short Name 和 Long Name，Short Name 即显示在列头上的名字，Long Name 是对列的详细表述，相当于标题，Short Name 是必须的，Long Name 是可选的，Short Name 有 17 个字符的限制，Long Name 的长度没有限制，作图时如果有 Long Name 会自动作为坐标轴名称。

（2）Units：单位。即列数据的单位。与 Long Name 一起自动成为坐标轴的标题，例如 A 列定义为自变量 X，长名（Long Name）为 Time，单位（Units）为 sec，则作图时 X 轴坐标显示为 Time (sec)。

（3）Comments：注释。对数据的注释，直接输入即可，如果需要多行，可在行尾按 **Ctrl + Enter** 键换行，作图时会以注释第一行作为图例。

以上为默认表头，输入简单，限制较少，可以使用 Format 和 Style 两个工具栏对格式进一步设置，特别有意义的操作是输入上下标和希腊符号（见图 2.6），彻底解决了以前版本关于单位符号的问题，甚至也可以输入中文。8.0 以前的版本只有 Label 属性而没有这三个表头，当打开老版本的文件时，系统根据顺序，将 Label 各行加载为以上三种属性。

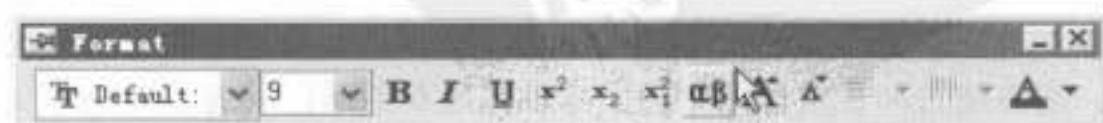


图 2.6 格式工具栏上的希腊符号格式按钮

(4) Parameters: 参数/条件。主要保存温度、压力、波长等实验条件或实验参数, 根据需要打开显示, 也可以在表头部分按鼠标右键, 选择 Insert 插入。

(5) Sampling Interval: 采样率。例如声音波表数据, 数据量巨大, 通过设置采样率以减少数据量。

(6) Sparklines: 简略图。能够动态地显示本列数据为简略图, 便于观察数据趋势, 生成的图形会成为一个图形对象, 可以编辑, 也可以置换。

(7) User-Defined Parameters: 自定义参数。选择 Format 格式菜单, 打开 Worksheet 工作表属性对话框, 单击 Edit Column Label Rows 按钮, 选择添加一些附加参数项即可。

以上各项除了打开显示输入外, 也可以单击某行, 按鼠标右键, 选择相应的快捷命令进行设置, 例如将某行设置为参数行, 则选中某行, 然后按鼠标右键, 在快捷菜单中选择 Set As Parameters, 如图 2.7 所示。

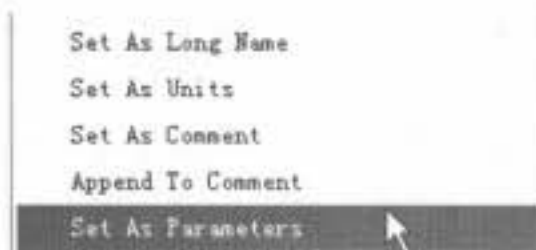


图 2.7 将行设置为表头

如何希望进一步设置工作表的显示形式, 可以使用 Format 菜单下的 Worksheet 或用鼠标右键直接单击工作表空白处, 选择 Prosperities 即属性项, 打开工作表属性对话框, 进行详细的设置, 如图 2.8 所示。

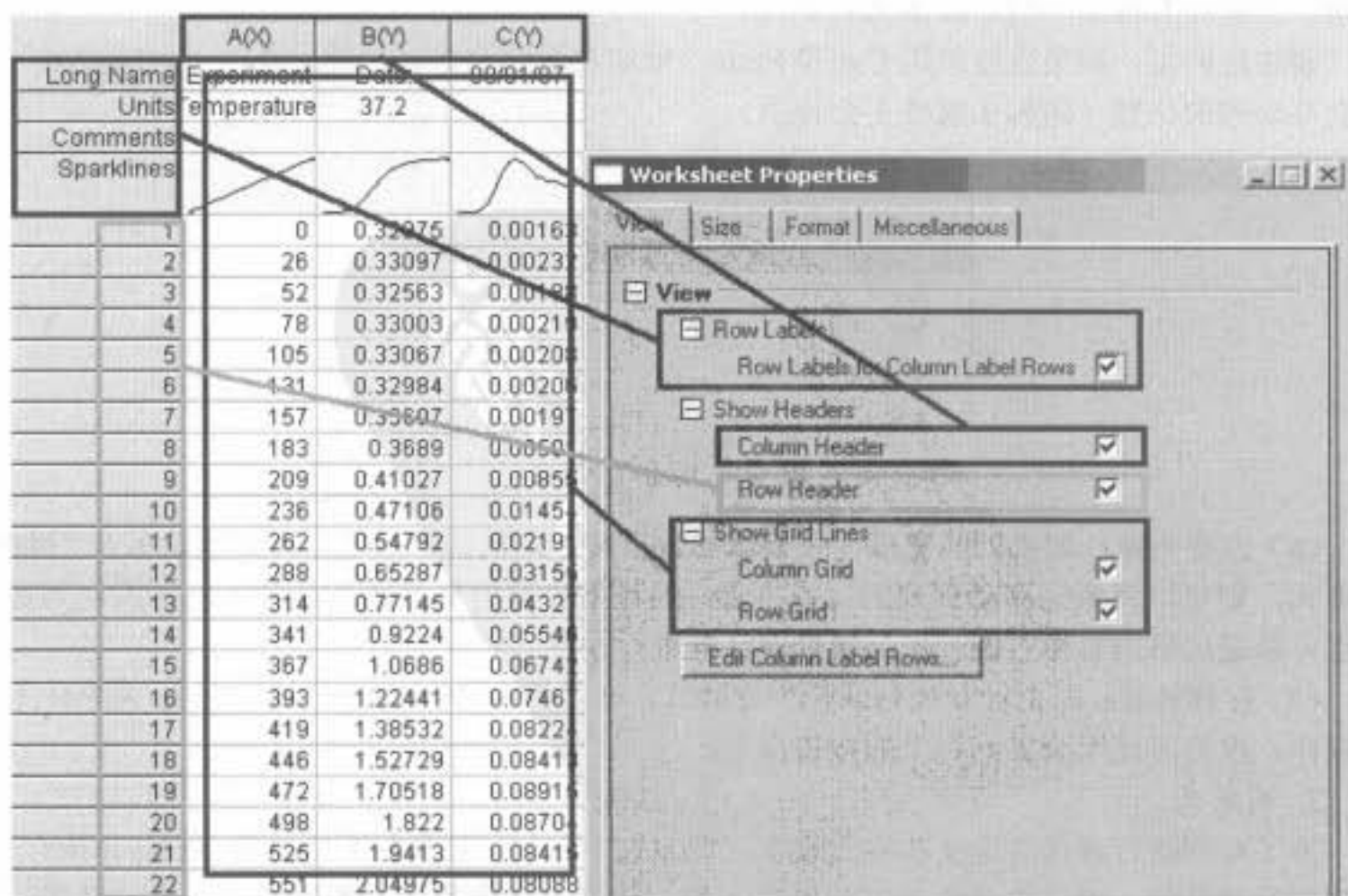



图 2.8 工作簿显示设置

2.1.3 列操作

列操作主要包括列定义、格式设定、列编辑等，列操作特别是列定义与作图关系最为密切，这也是 Origin 数据表与普通的电子表格的主要区别所在。

1. 列编辑

列编辑包括列的添加、删除、位置移动等。

(1) 添加/追加列：Worksheet 默认为两个列，列名分别为 A 和 B 并自动定义 A 为 X，B 为 Y。如果需要增加一个或多个新列，则可以选择列菜单 (Column: Add New Columns)，更简单的方法是单击标准工具栏上的  按钮。添加的列会自动加在最后面，新的列名会按英文字母 (A, B, C, ..., X, Y, Z, AA, BB, CC, ...) 顺序自动命名，如果前面有一些列被删除，则自动补足字母顺序，默认情况下所有新列被定义为 Y。

(2) 插入列：如果不希望列添加在最后面，可以采用插入列的操作，方法是单击某列，使用 Edit 菜单的 Insert 命令，或者单击鼠标右键选择 Insert，则新列会添加到当前列前面，命名规则与追加列相同。

(3) 简单的采用上面的操作若干次，则会追加或插入若干个列。

(4) 删除列：单击某列按鼠标右键选择 Delete 或采用 Edit 菜单的 Delete 命令。删除列的操作要小心，因为删除后数据不能恢复，而且跟这些数据有关的一系列图形、分析结果也会随之变化。如果只是希望删除列数据，则选择 Clear 命令而不是 Delete 命令。

(5) 移动列：移动列即调整列的位置，操作方法是先用鼠标选中某列 (单击列头)，然后选择三种方式之一进行操作：①按鼠标右键使用快捷菜单。②打开列操作工具栏进行操作。③使用列菜单 Column 中的相关命令。具体操作包括四种，即移到最左边、移到最右边、向左移动一列和向右移动一列，如图 2.9 所示。

要注意的是：如果直接采用 Cut 和 Paste (剪切和粘贴) 操作，则只移动“列的数据”而不会移动列的位置 (即列头属性不会移动)。

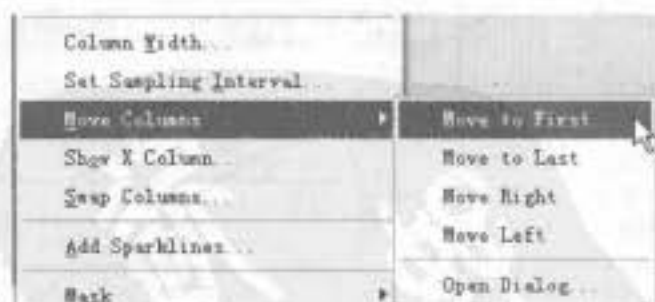


图 2.9 移动列菜单

(6) 改变列宽：如果列的宽度比要显示的数据窄，则数据显示不全，实际显示为“####”的形式，则可以将鼠标移动到列的边界位置，通过拖曳列边界线适当加大列的宽度，列宽大小也可以通过单击鼠标右键使用列属性对话框进行设置。

(7) 行列转置：即把行变成列或把列变成行，可以使用 Worksheet: Transpose 菜单命令进行操作，也可以使用列工具栏上的按钮命令。

2. 列定义

为了对列进行详细的定义和格式设置，需要选中某列，按鼠标右键选择 Properties，打开列属性对话框。对话框分成三部分内容，第一部分是名称和单位等说明即表头的设置，第二部分是列宽设置，第三部分则是列定义和格式设置，如图 2.10 所示。



图 2.10 列定义设置对话框

列定义 (Column Plot Designations) 为每个列给出一个明确的指示, 以便于 Origin 进行作图和数据分析, 可以通过属性对话框中的 Plot Designations 下拉菜单, 将列定义为 X (X 轴坐标), Y (Y 轴坐标), Z (Y 轴坐标), Label (标签, 数据点标志), Disregard (不指定), X Error (X 误差), Y Error (Y 误差) 7 种中的任一种, 设置结果会体现在数据表上, 如图 2.11 所示。

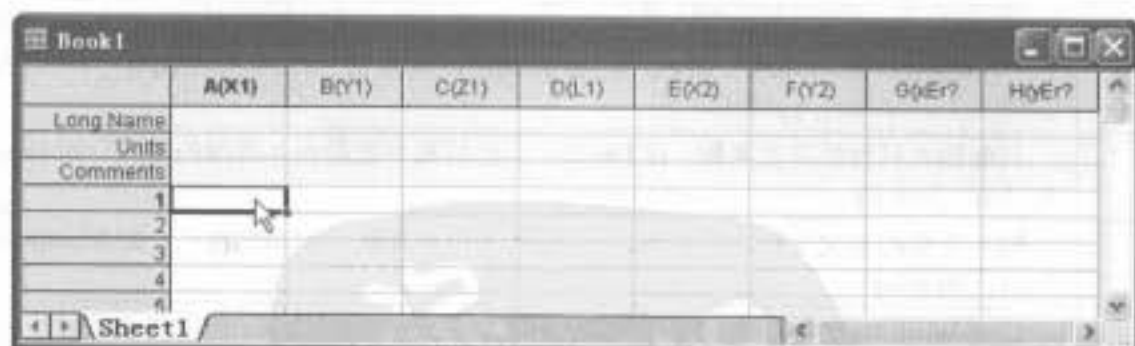


图 2.11 定义后的工作表

其中 X (自变量) 和 Y (因变量) 是最基本的类型。一般情况下, 如果要作图, 一个表至少要应有一个 X 列, 一个 X 列可以对应有一个或多个 Y 列。如果有多个 X 列, 则规则是: 没有特别指定情况下, 每个 Y 列对应它左边最接近该列的第一个 X 列, 即“左边最近”原则, 作图和数据分析都基于这种假设。对于多 X 列和多 Y 列, 从左到右第一个 X 列显示为 X1, X2..., Y 列显示为 Y1, Y2...。

如果不想打开属性对话框, 也可以选中某列单击鼠标右键选择进行 Set As: Designation. 在 X, Y, Label 等 7 项进行指定。如果选中的是多列, 则可以选择 XYY, XYXY, XYYXYY, XYYYYXYYY 等几种常用设置。

在作图和数据处理过程中可以随时随地进行设定或更改设定, 但对于具体的科学实验来说, 由于数据具有特定的物理意义, 不可能随意更改, 因此软件提供的这种灵活性其实意义不大。

3. 列格式

列格式包括 Format（格式），Display（显示）和 Digits（位数）三部分，如图 2.12 所示。

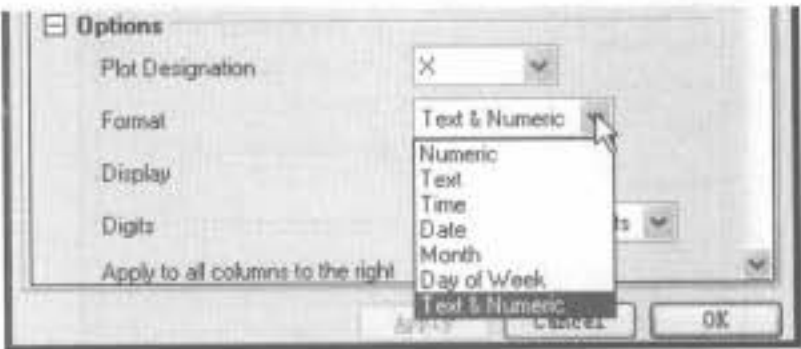


图 2.12 列格式设置

(1) Format。

指定当前列中数据的类型：共有 7 种，默认为 Text & Numeric，即字符和数值型（数学运算时会自动识别）。如果将数据指定为其中任一类型，则输入其他类型的数据时可能显示不正确，如指定当前列为 Numeric，若输入“实验数据”等字符型数据则不能显示，格式各项对应的情况具体见表 2.1。

表 2.1 数据格式说明

选 项	功 能
Numeric	数值型：只能输入阿拉伯数字，在 Display 下拉列表中可选择科学计数法等来显示数据
Text	字符型：将被当作文本处理，不能参与计算、绘图等
Time	时间型：采用 24 小时制，格式为：小时:分:秒:分秒，以冒号间隔开，具体的格式可在 Display 下拉列表中选择，如 HH:mm、HH:mm:ss、HH:mm:ss:##
Date	日期型：只能输入客观存在的日期，以空格、斜线或连字符连接，对于不完整的日期，系统默认为当前日期，因此一般输入完整的日期。具体的格式可在 Display 下拉列表中选择，如 2006-9-13HH:mm、yyMMdd 等
Month	只能输入月份的英文名称，在 Display 下拉列表中选择输入月份的格式：如 January 可以输入：J、Jan、January
Day of Week	输入星期的英文名称，在 Display 下拉列表中选择输入星期的格式：如 Monday 可表示为：M、Mon、Monday
Text & Numeric	这是 Worksheet 中列数据的默认类型，可接受任何类型数据。但字符型数据进行运算时将视为空值

实际应用中 Text & Numeric 和日期/时间类型用得最多。

(2) Display。

在选择数据的相关类型后，可在 Display 下拉列表中选择显示的格式，如图 2.13 所示为 Text & Numeric 的显示格式，其意义见表 2.2 和表 2.3。

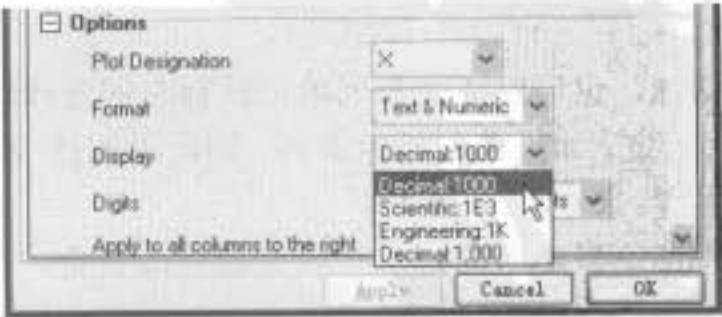


图 2.13 列格式显示

表 2.2 显示选项及其对应意义

选 项	功 能
Decimal	十进制
Scientific	科学计数法
Engineering	用工程单位来表示, 换算如下表所示
Decimal	十进制, 以逗号每逢 3 位隔开

表 2.3 Format 为 Text & Numeric 时 Display 选项的意义

数值	10	100	1000	10000	100000	1000000	10000000
Decimal:1000	10	100	1000	10000	100000	1000000	1E7
Scientific:1E3	1E1	1E2	1E3	1E4	1E5	1E6	1E7
Engineering:1K	10	100	1K	10K	100K	1M	10M
Decimal:1,000	10	100	1,000	10,000	100,000	1,000,000	1E7

(3) Numeric Display。

只有当 Format 选项为 Text & Numeric 或者 Numeric 时, Numeric Display 才出现, 如图 2.14 所示。

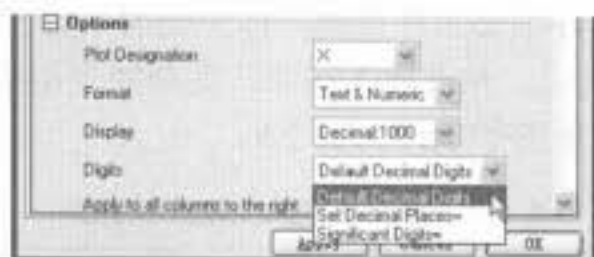


图 2.14 Numeric Display 中的 3 个选项

Numeric Display 的各项功能见表 2.4, 设定数据的小数位数及有效数字位数如图 2.15 所示。

表 2.4 Numeric Display 各项功能

选 项	功 能
Default Decimal Digits	显示 Worksheet 单元格中的所有数据, 数字位数由 Options 对话框中的 Numeric Format 选项卡中的 Number of Decimal Digits 下拉列表选项决定
Set Decimal Places=	设置输入数据的小数位数, 在下拉列表中选择此项后, 右边出现输入框, 在其中输入所需要的小数位数, 默认状况下为 3, 若输入的数据小数位数小于 3, 则系统自动补足; 小数位数大于 3 时, 系统根据四舍五入原则进行取舍。如 1E7 将显示为: 1.000E7
Significant Digits=	设置输入数据的有效数字位数, 同样在下拉列表中选择此项后, 右边出现输入框, 在其中输入所需要有效数字的位数, 默认值为 6, 可根据实际情况设定此值, 系统将根据具体数据多舍少补。如 1E7 将显示为: 1.00000E7

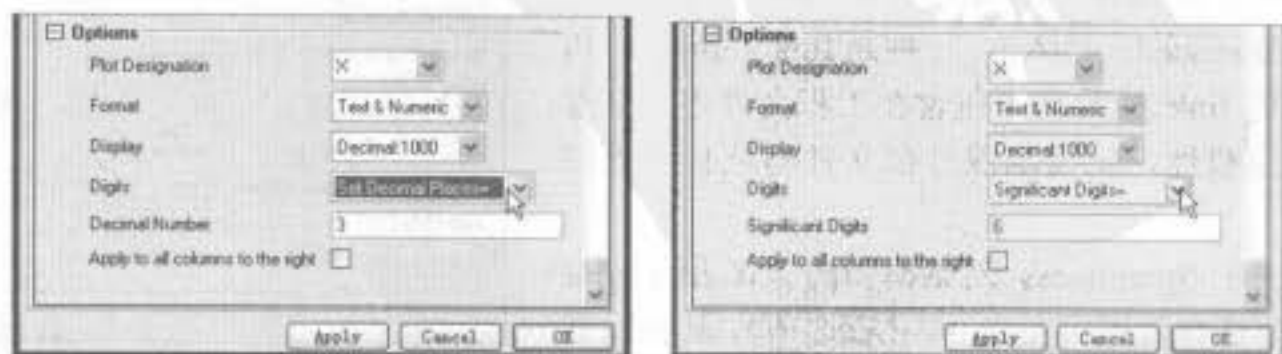


图 2.15 设定数据的小数位数及有效数字位数



若将Apply to all columns to the right前面的复选框选中，则整个Worksheet中的列都按照当前设置。

2.1.4 行编辑

行即实验记录 Record，与列操作相比，行的操作比较简单。

(1) 改变行高：通过移动行边界线进行调整。

(2) 插入行：默认为 32 行。要插入新行，用鼠标单击行首选中某行，按右键快捷菜单选择 Insert 命令或采用 Edit: Insert 菜单。要插入 n 个新行，可以采用插入单行的操作进行多次，或选择 n 行后，再执行一次插入操作。

(3) 删除行：选中一行或多行，按右键选择 Delete 或用 Edit: Delete 菜单。

2.1.5 单元格操作

单元格的最基本操作是单元格选择和数据输入，其操作方式与 Excel 等电子表格软件相同。至于单元格的格式设置问题，由于每个列根据其物理意义已经进行了列定义和列格式设定，因此具体单元格的格式最好不要另外设定，以免作图和数据运算出错。

新版的单元格支持 RTF 格式，允许插入对象，其功能变得很强大，插入的方法是用鼠标单击单元格，选择相应快捷菜单的子项，见表 2.5。


表 2.5 单元格插入元素及其意义

插入对象	说 明
arrow	箭头，包括向上箭头和向下箭头
graph	插入 Origin 图形
images	插入图像，允许 JPG, .BMP, .GIF, etc.等格式，也可以从粘贴板中粘贴
notes	备注，可以输入任意的字符
Sparklines	简略图
info variables	变量信息

(1) 关于 Note：备注内容不会直接显示在单元格中，要显示或编辑备注内容，需要双击单元格打开记事本进行编辑，若要删除直接按删除键即可。

(2) 关于 Images：插入图像后使用 Image 菜单，可以进行相关的图像处理，图像处理一般在 Matrix 窗口中进行，后面有专门章节介绍。

(3) 关于图像图形对象：对象的插入有两种形式，一种是 embed（嵌入），一种是 link（链接），两者的区别是 link 的数据不包含在工程文件中，要保持数据的完整性，就要确保外部文件与项目文件同时存在。

(4) 关于 Sparklines：对话框如图 2.16 所示，最重要的是要选择数据所在列（单击  选项），其他设置主要是相关信息呈现和简略图的设置。

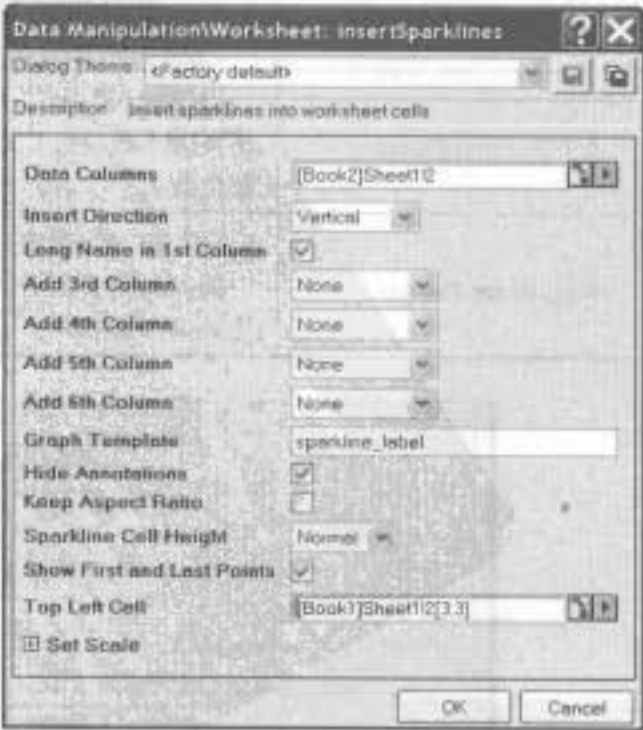



图 2.16 插入 Sparklines

 加入的Sparklines即缩略图,可以使用鼠标双击Sparklines所在单元格,即可以打开Graph图形窗口,像一个普通的图形一样进行编辑和设定。

2.1.6 数据变换

1. 数据变换

大部分原始实验数据必须进行适当的运算或数学变换才能用于作图, Origin 提供了在电子表格中进行数据变换的功能, 要注意这种换算通过是以列为单位进行的, 这是因为 Origin 中的列是有特定物理意义的。

基本操作是选中某个数据列, 按鼠标右键选择 Set Column Values 或直接单击菜单 Column: Set Values, 打开数据变换对话框, 如图 2.17 所示。

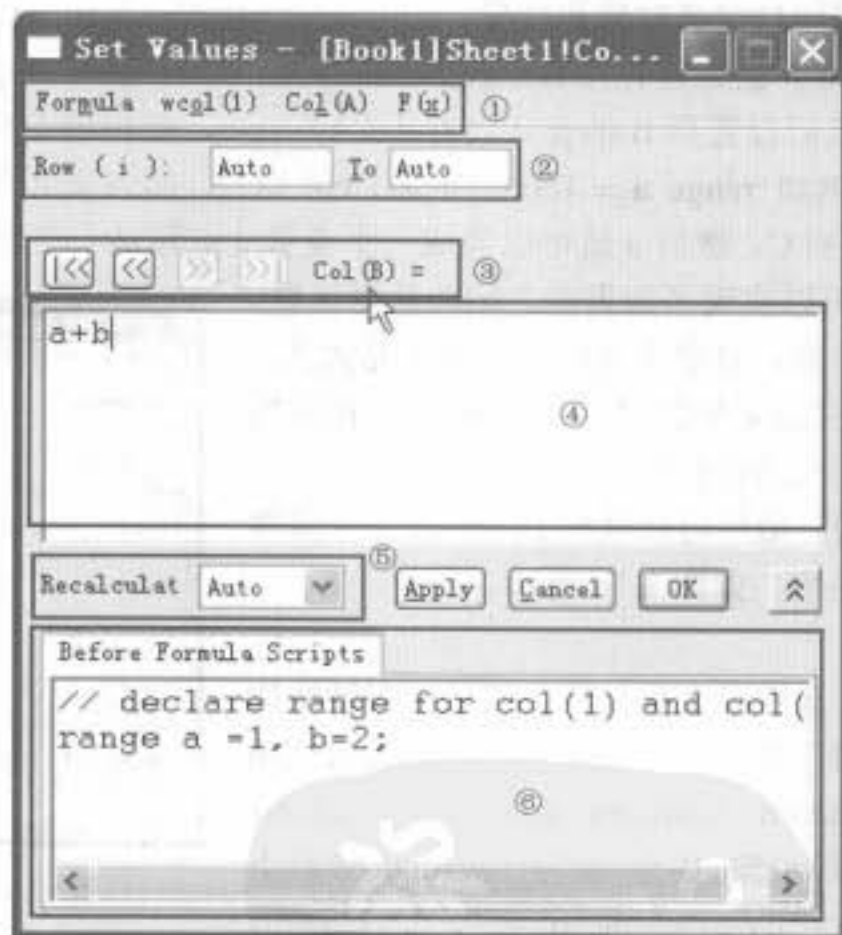


图 2.17 Set Values 对话框

对话框说明如下:

(1) 菜单栏。Formula: 公式, 利用这个菜单可以把已有公式进行保存或加载, 还有一些预定义公式的例子。wCol(1) 和 Col(A): 分别用数字或名称代表不同的数据列, 对应其实是要运算的范围。F(x): 分类列举的大量内部函数。

(2) 行的范围, 默认为自动, 通常是整列数据。

(3) 通过移动按钮, 在不同的数据列间进行切换, 以便一次设置多个列的运算公式。

(4) 具体的运算公式, 可以使用“+、-、*、/、^”等基本运算符, 内部函数, 列对象和变量进行组合。

(5) 重计算选项, 即如果数据源发生变化, 结果数据要不要同步变化, 有三个选项, 包括 None 则不自动重算、Auto (默认值) 即自动重算、Manual 手工决定是否重算, 选择后两

个选项后列上会出现一外“锁”状标记,用鼠标单击这个标记可以实现重算 Recalculation 和其他选项的设置。

(6) 预处理公式脚本:在这里可以自定义变量,这些变量也可以是数据对象,公式的运算是先执行这个脚本,然后再算公式框中的公式,这样就可以进行更复杂的运算。

实际操作的数据运算与变换分成三个层次示例:

(1) 简单数据运行:设 A 列为原数据, B 列为运算结果,则利用“+,-,*,/,^”等运算符进行公式设置,例如为 B 列设置公式为:Col(A)*2 则表示,将 A 列数据乘 2 后将结果放于 B 列中。要注意这一方法也可以本列自我计算,例如原数据在 A 列,结果数据在也在 A 列,公式运算也会是正确的(只是原数据会被清除,因此不能设置为自动重算)。

(2) 使用内部函数,例如将列 A 的数据(弧度)运算正弦函数的结果放为列 B,则为列 B 设置公式为 sin(Col(A))。

(3) 高级功能:采用自定义对象和变量。

1) 设置自定义变量,例如首先在 Before Formula Scripts 中输入 range a=1, b=2; 即设置变量 a 为 1, b 为 2,然后设置列 B 的公式为 Col(A)*b-a,则相当于列 A 数据加倍并减 1。

2) 自定义对象,例如 range a=[book1]data1!col(C),即自定义变量 a 为工作簿 book1 的工作表 data1 的数据列 C,然后 a 就可以当成一个变量(实际是一个数据列)在公式框中进行运算。用这个方法,可以实现多数据表之间的数据运算。

当然对于简单的运算,自定义变量的意义不是太大,然而脚本编程最重要的意义是其灵活性、通用性和结构性,适当的学习一下完全是值得的。

如果公式比较重要,最后可以使用 Formula 菜单保存起来,以便以后再次使用,如图 2.18 所示。

2. 自动数据填充

填充行号或随机:选中多个单元格,按鼠标右键快捷菜单,选择 Fill 命令的三个选项:Row Number 即自动填充行号,Normal Random Numbers 随机数,Uniform Random Numbers 均匀随机数。以上操作在 Column 菜单下也相应命令。

如果希望根据已有数据实现数据填充,首先选中这些单元格,将鼠标移动到选区右下角,出现“+”光标,使用鼠标进行拖放,拖放时按 Ctrl 键则实现单元格区域的复制,按 Alt 键则会自动根据数据趋势进行填充(即选择“1”和“2”,再向下拖放出现“3”、“4”、……)。

3. 数据的查找与替换

采用编辑菜单的相关指定即可完成数据的查找或替换。

查找菜单项为:Edit: Find,替换菜单项为:Edit: Replace,输入要查找的字符单击相应的按钮即可。



图 2.18 Set Values 示例

2.2 数据导入

作为一个科学作图和数据分析软件,直接在电子表格中录入数据并不是一种有效率的数据输入方式。事实上,在 Origin 进行处理的大部分实验数据通常来自于其他仪器或软件的数据

据输出。因此,数据的导入在重要性上甚至要超过数据表的操作。当然,数据导入后的数据变换也是很重要的。

实验数据的来源,或者说数据格式可以分成三大类:

第一类是典型的 ASCII 码文件,即能够使用记事本软件打开的普通格式文件,这类文件以每一行作为一个数据记录,每个行之间用逗号、空格或 Tab 制表符作为分隔,分开多个列。这类数据格式是最简单和最重要的,通常大部分仪器软件会支持 ASCII 码格式的导出。因此这种格式的导入方法最为重要,而其他格式的导入初学者可先跳过。

第二类是所谓的二进制(Binary)文件。这类文件与 ASCII 文件不同,首先其数据存储格式为二进制,因此普通记事本打不开。其优点是数据更紧凑,文件更小,便于保密或记录各种复杂信息,因此大部分仪器软件采用的专用格式基本上都是二进制文件;其次是这类格式具有特定的数据结构,每种文件的结构并不相同,因此只有当打开者能够确定其数据结构的情况下才能导入。

基于以上考虑,一般情况下还是尽量使用具体仪器软件导出为 ASCII 格式再来以 ASCII 格式导入而避免直接导入二进制格式。但有部分特殊格式是可以选择直接导入而无需再导出 ASCII 格式的,这部分格式就是 Origin 能够直接接受的第三方文件格式。Origin 支持这类格式的原因是这类第三方软件很常用,文件格式比较固定。

第三类可以统称为数据库文件,即从技术上能够通过数据库接口 ADO 导入的数据文件,其范围相当广泛,如传统的数据库 SQL Server, ACCESS 等和电子表格 Excel 数据文件等。导入这类文件时可以选择性地导入,即先“查询(query)”进行筛选,再导入,Origin 中提供了数据库的查询环境。

除了从数据文件中导入数据外,另一个导入数据的途径是粘贴板中的数据,这主要是方便 Origin 与其他软件的直接数据交换和共享。这类数据如果其数据结构特别简单,则可以直接在 Origin 的数据表中粘贴即可,如果结构复杂,则需要特别加以处理。

另外,另一个简单的导入数据的方法是使用 Windows 平台常用的拖拉放操作,即把数据文件直接拉到数据窗口实现导入。

数据的导入,其主要工作步骤主要是:①根据数据文件格式选择正确的导入类型;②采用正确的数据结构对原有数据进行切分处理,获得各行各列数据;③根据具体情况设定各数据列格式。

2.2.1 导入 ASCII 格式

ASCII 格式是 Windows 平台中最简单的文件格式,常用的扩展名为*.txt 或*.dat,几乎所有的软件都支持 ASCII 格式的输出。ASCII 格式的特点是由普通的数字,符号和英文字母构成,不包含特殊符号,一般结构简单,可以直接使用记事本程序打开。

ASCII 格式文件由表头和实验数据构成,其中表头经常被省略。实验数据部分由行和列构成,行代表一条实验记录,列代表一种变量的数值,列与列之间采用一定的符号隔开。典型的符号包括“,”(逗号)、“ ”(空格)、“TAB”(制表符,一种计算机能识别而我们看不到的符号,用记事本打开会看到几个空格)等,如果不采用以上符号,也可以采用固定更宽,即每列占用多个字符位置(不足时用空格填充)。

图 2.19 是一个典型的多列 ASCII 格式数据,使用记事本程序打开可以看到第一行为表头,表示各列的物理意义(名称)。第二行以下都是数据,从中可见每行数据的个数对应着表头

的列数。第 7 行的数据格式没有对齐，这是因为这些数据包括表头都采用“TAB”制表符进行分隔，因此我们看起来数据之间的空格参差不齐，但对计算机来说，数据之间的空格不管有多少个，计算机都会识别为一个字符（制表符 TAB 对应 ASCII 码为 9，其长度只算一个字符）。



Indep1	Indep2	Indep3	Dep
0.860591635760228		0.108325963801558	0.399054546988653
0.405849525285829		0.463523388914599	0.038730535378651
0.442197751801876		0.860838869027224	0.850807172152302
0.75473984495065		0.653015069454387	0.388098312294062
0.439459931838835		0.839640453936873	0.374380299532634
0.0866702311605971		0.202581652534376	0.225843784859218
0.115121912013869		0.323174192792749	0.202113114173462
0.0574999729898071		0.288531654442143	0.3074613607625
0.189518906650472		0.484560245404944	0.549346394981224
0.696982260365713		0.332856638405594	0.786217965980021
0.311751975921515		0.39712279779321	0.441664138778538
0.0439219429630711		0.197117709030733	0.614211270368991

图 2.19 典型的 ASCII 码数据文件

Origin 采用分两种情况处理 ASCII 文件的导入，分别是对应菜单中 File>Import>Single ASCII 和 File>Import>Multiple ASCII 命令项，两者的区别是后者可以一次导入多个文件。更复杂的数据导入则需要使用导入向导 Import Wizard。

1. Import Single ASCII


使用菜单命令 File>Import>Single ASCII 或单击标准工具栏上的导入 Import Single ASCII 按钮（），这三个按钮分别对就“导入向导”、“单文件导入”和“多文件导入”，即可打开如图 2.20 所示的对话框。



图 2.20 导入单个 ASCII 码数据文件对话框

对于简单的 ASCII 文件，直接点击“打开”按钮导入即可，如果要进行详细的设置，则需要打开“Show Options Dialog”选项

通过这个文件打开对话框,选择某一需要导入的数据文件(必须为 ASCII 格式),单击“打开”按钮即可把默认的参数导入所需数据文件,软件会尝试识别文件格式、分隔符、表头等,并自动为数据列增加 Sparklines 简略图。

要注意的是,这种导入的默认参数是覆盖当前数据表中的数据,因此如果不希望覆盖,则要么要保证当前数据表为空表,要么进行参数设置。

如果文件格式简单,直接导入即可,如果希望详细设置,则打开选项对话框。

打开参数设置的方法是先选择数据文件,然后选中“Show Options Dialog”,再单击“打开”按钮,此时打开如图 2.21 所示的对话框。

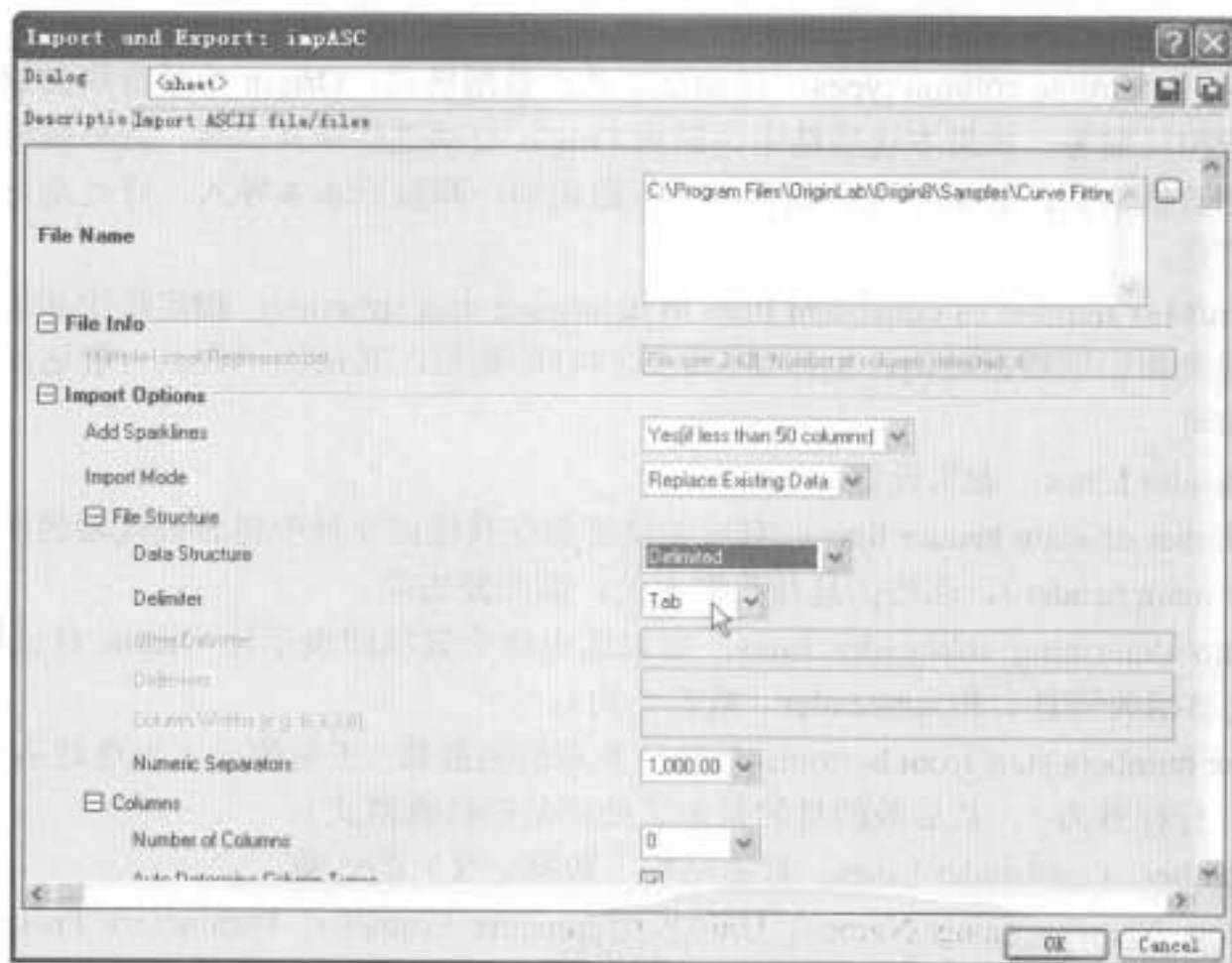


图 2.21 ASCII 格式导入选项

本对话框提供了对文件数据源的各种详细处理参数的设置,内容比较复杂,实际应用时大部分选项保留系统默认值即可。自上而下说明如下:

(1) Add Sparklines: 是否增加简略图,建议采用默认选项即少于 50 个数据自动增加。

(2) Import Mode: 导入的数据与当前的数据表是什么关系,默认是代替当前数据,其他选择包括建立新工作表、工作簿、追加列、追加行等。

(3) File Structure: 文件结构

1) Data Structure: 数据结构,包括两种格式:一种是分隔符,一种是固定宽度。固定宽度较简单,输入每列字符数即可。分隔符即采用逗号、TAB 或空格等分开数据的格式。大部分实际数据存放以分隔符方式为主,因为固定列宽方式更浪费存储空间,效率较低。

2) Delimiter: 分隔符:包括 Unknown (未知)、comma (逗号)、tab (TAB 制表符)、space (空格)和 Other (其他)。

如果用户能够确定分隔符为逗号、TAB 或空格中的一种,则直接选择。如果确定有分隔

符但不是以上三种,则可以选择 Other 进行定制,直接输入分隔符的符号即可,常用的其他分隔符如引号、冒号“:”和斜线“/”。

如果不能确定分隔符,也可以选择“Unknown”,则 Origin 会搜索数据文件,尽量找到有效的分隔标志。

3) Numeric Separators: 数据中有些内容与分隔符会有冲突,例如 1,000 代表 1000,而不是代表 1 和 000 两个数值,因此在处理时软件会适当加以识别区分。

(4) Columns: 设置。

1) Number of columns: 指定列数。默认为 0 表示原文件有多少列就导入多少列。但如果指定了列数 n,若数据文件中数据少于指定的列数,则会自动建立多个空列,若数据文件中的列数更多,则只装入指定数量的列。

2) Auto determine column types: 自动设定各列数据格式。Origin 中最常用的数据格式是数字、字符和日期等。如果本选项选中,则由 Origin 自动进行格式识别,好处是导入后不用再设置列的数据格式;如果不选,则导入时不做识别,即原原本本导入,好处是可以完整的保留所有信息。

3) Min/Max number of consistent lines to determine data structure: 指定最少和最多行数据以便软件搜索和识别数据结构,也即要保证这些行的数据,其结构一致,一般这两个数据由软件确定即可。

(5) Header Lines: 表头设置。

1) Number of main header lines: 有一些仪器会在其输出文件中包含该仪器的型号生产日期等信息(main header),这些信息与数据无关,因此要去除。

2) Auto determine subheader lines: 如果选中这个选项即表示让 Origin 自己检测 main header (仪器相关信息)和 subheader (数据结构)。

3) Line numbers start from bottom: 行号计数从后向前数(正常情况下当然是从前向后数,即开头第一行行号为 1,从后数的目的是为了处理某些特殊格式)。

4) Number of subheader Lines: 数据结构(数据定义)的行数。

5) Short Names、Long Names、Units、Comments From/To、Parameters From/To、User Parameters From/To: (列)短标头名称、长标头名称、单位、备注、参数、用户参数分别对应的行号,如果指定为“none”表示没有这一部分参数,由软件根据情况设为空白或自动生成默认值。

(6) File Name: 文件名信息。本部分用于指定数据导入后生成的工作簿和工作表的命名问题,通常是保留文件名有关信息,以便以后知道数据从何而来。

(7) Partial Import: 部分导入。

1) Partial import: 选中本项即表示部分导入,而不是导入全部数据。

2) From/To Column: 指定从哪一列导入到另一列。

3) From/To Row: 指定从哪一行导入到另一行。

4) Skip data rows/Read rows: 跳过多少行然后连续读多少行,不断重复。

(8) Miscellaneous: 杂项。

1) Text Qualifier: 是否有用引号限定。

2) Remove quotes from quoted data: 如果数据有引号则删除引号。


3) Support numbers with leading zeros: 删除数据开头的 0。

4) When non-numeric is found in numeric field: 如何处理数据域的非数据数值, 通常的选择是当成文本读入, 以后再处理。

(9) Output: 输出数据范围。

(10) Results Log Output: 输出日志记录, 输出到 Log Results 窗口。

2. Import Multiple ASCII

使用菜单命令 File>Import>Multiple ASCII 或单击标准工具栏上的导入 Import Multiple ASCII 按钮 ( , 中的第 3 个), 即可打开如图 2.22 所示对话框。

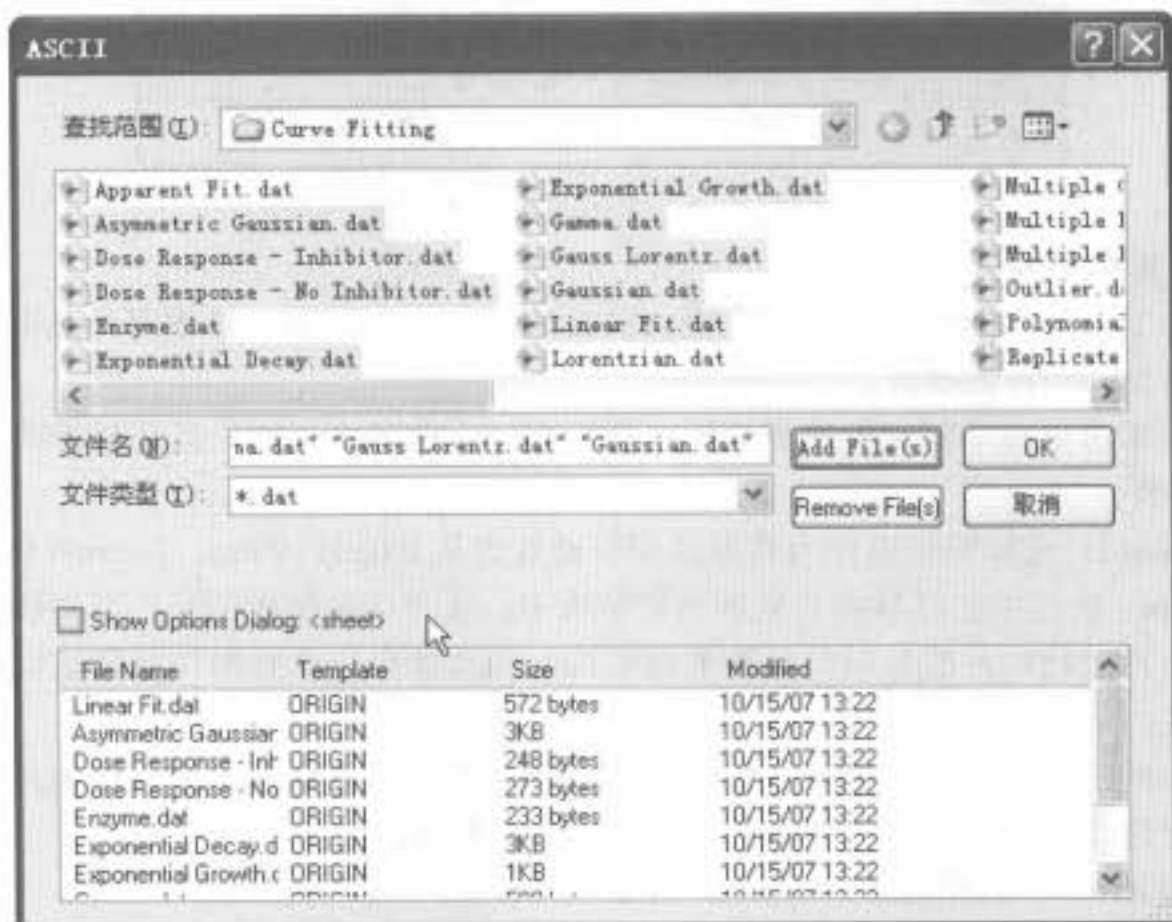



图 2.22 一次导入多个 ASCII 格式文件

利用这个对话框可以一次导入多个数据文件, 方法选中所需数据文件单击“Add Files”添加, 也可以配合功能键 Ctrl 或 Shift (按 Ctrl 键每次添加一个, 不需要连续, 按 Shift 键则添加连续的多个文件), 添加后如果也可以单击“Remove Files”删除部分不需要的文件, 最后单击 OK 键即可以导入。

与导入单个文件一样, 可以选中“Show Options Dialog”打开选项设置对话框进行细节设置, 则对同一时间导入的数据文件采用相同导入参数。

2.2.2 导入向导详解

数据导入向导 (Import Wizard) 提供了一个更加复杂和功能更强大的数据导入平台, 用于一步一步地引导用户处理各种格式和参数设置。使用菜单命令 File: Import: Import Wizard 或单击标准工具栏上的导入 Import Wizard 按钮 ( 中的第 1 个按钮), 即可打开以下导入向导, 如图 2.23 所示。以下对向导的各个窗口进行说明。

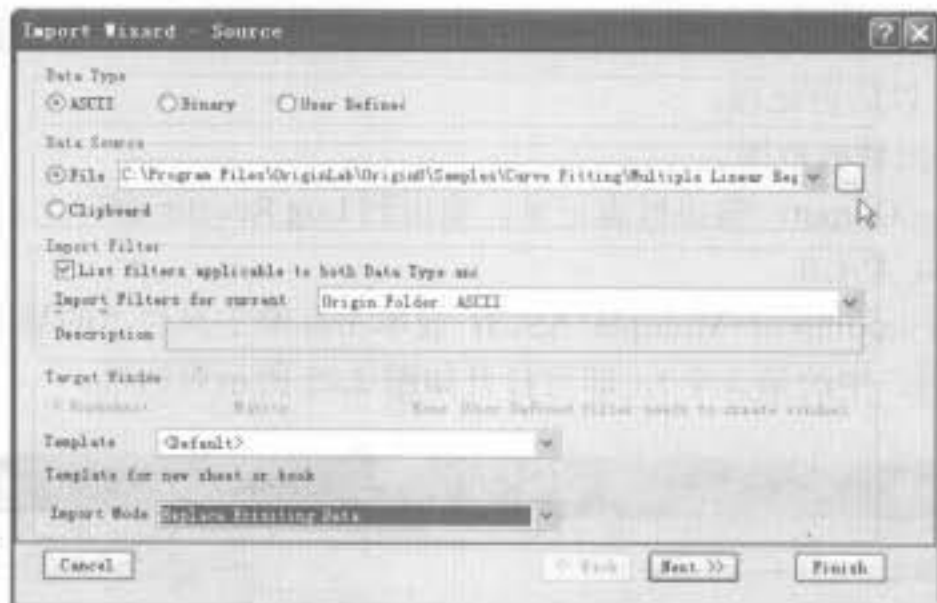


图 2.23 导入向导界面：数据源

Source: 数据来源。

(1) Data Type: 数据类型。可以选择 ASCII 码文件、二进制文件或用户自定义。

(2) Data Source: 数据源。

1) File: 单击鼠标所指文件选择按钮选择数据一个或多个文件，其选择方式与选择多个 ASCII 文件一样。

2) Clipboard: 选择粘贴板作为数据源则需要首先从 Excel、Word、Internet Explorer 网页或其他 Windows 软件中选择数据并复制到粘贴板中。选择从粘贴板中导入与直接在数据表中粘贴的区别是直接粘贴只能处理简单的数据结构，因此如果数据结构较复杂建议尽量使用这个向导的功能。

(3) Import Filter: 导入过滤器。导入向导的所有设置可以保存为导入过滤器以便多次使用。这里是要选择一个过滤器，以便获得以前设置的参数。

(4) Template: 导入模板。

(5) Import Mode: 导入数据存放位置。可以选择新建数据表、替换当前数据或其他选项。

1. ASCII 导入选项

数据类型的选择决定了向导略有差异，图 2.24 为 ASCII 类型的向导界面。



图 2.24 导入向导界面：文件名选项

(1) File Name Options: 对文件名信息进行处理。

(2) Header Lines: 处理表头。这个对话框与 ASCII 导入对话框基本, 只是编排位置略有不同。主要的区别是这个向导会自动预览文件中的数据, 如图 2.25 所示。数据上面的选项是显示字体 (Preview Font) 有三种字体进行选择, 以数据显示结果可读就行。

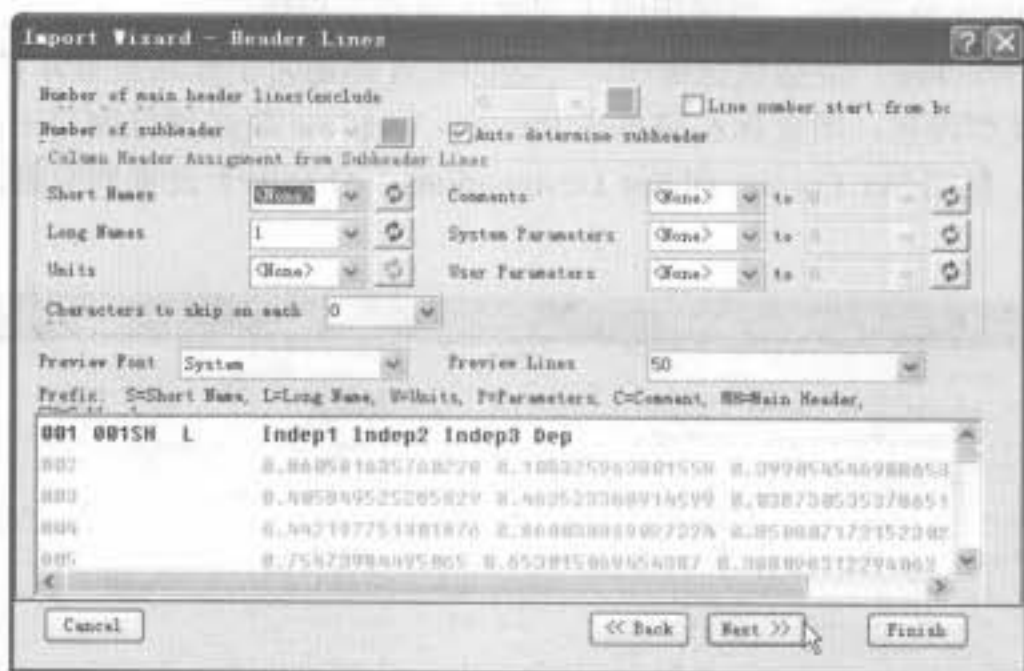


图 2.25 导入向导界面: 表头设置

(3) Variable Extraction: 导入时把一些源文件的信息也进行提取 (保存在项目文件中), 这样当有需要时就可以通过编程引用变量的方法对图形和数据进行注解, 如图 2.26 所示。

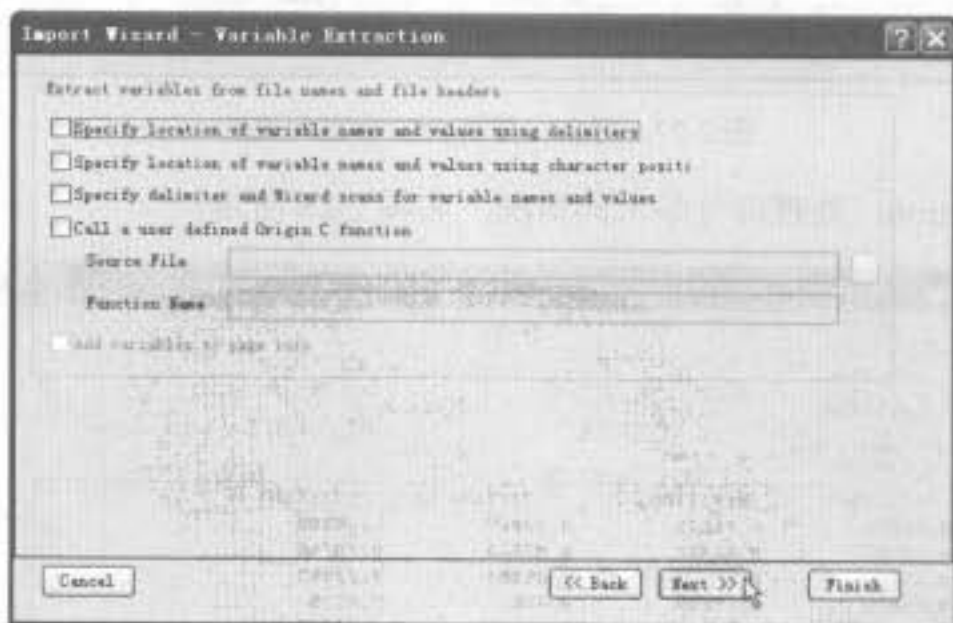


图 2.26 导入向导界面: 其他信息

(4) Data Columns: 数据列的处理。这个对话框的功能与 ASCII 导入时的对话框类似, 但功能强大得多。

1) Column Separator/Fixed Width: 分隔符选择或固定列宽。

2) Column Designations: 列定义。可利用现有模板或自定义, 将列数据导入后自动设定各列的变量类型 (是 X 变量? Y 变量还是误差变量等)。

3) Number of columns: 自定义列数。如果选 0 则软件自动确定。

4) Custom Date Format: 日期数据显示的格式。

- 5) Text Qualifier: 限定符, 双引号或单引号或没有。
- 6) Numeric Separator: 数据分隔号, 即实际数据中逗号和小数点出现的格式。
- 7) Remove leading zeros from numbers: 删除数据开始的 0, 如数据 0050 化自动处理为 50。
- 8) Add Sparklines: 增加简略图。
- 9) Column Width Preview: 当采用固定列宽选项才会出现。
- 10) Preview Window: 数据预览窗口。一切的设置都是为了在这里显示的数据是正确的。
- 11) 列数据类型设置: 用鼠标右键单击 Preview Window 数据预览窗口中的某个列, 会出现右键快捷菜单, 包括 Set Format 和 Set Designations, 分别用于设置列数据的格式和定义, 如图 2.27 所示。

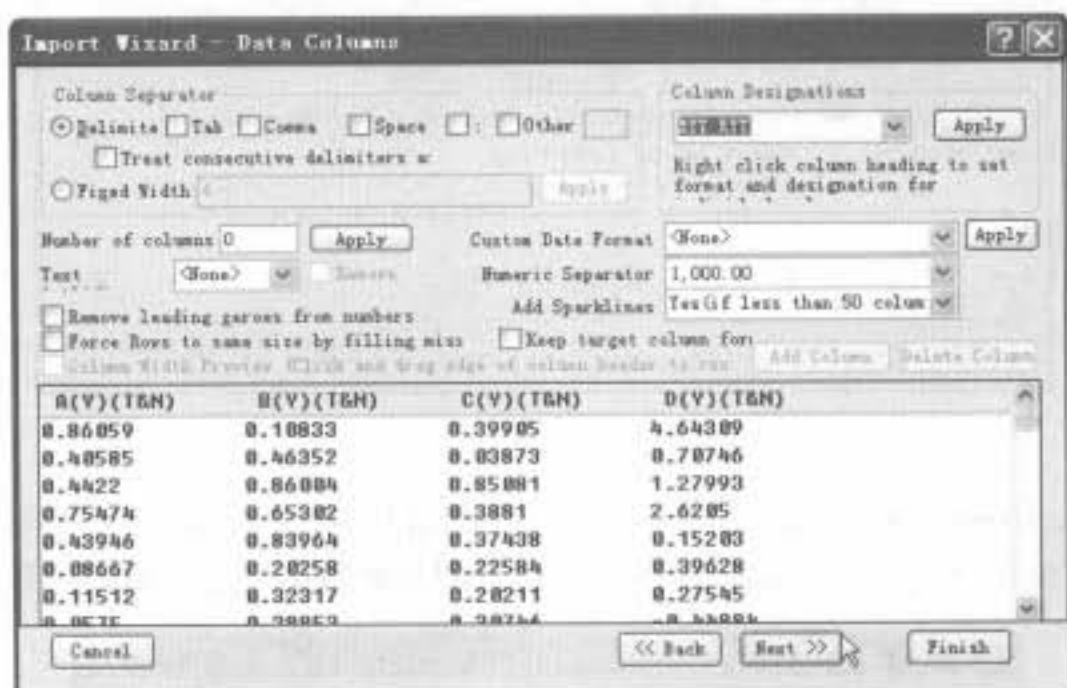


图 2.27 导入向导界面: 数据列设置

(5) Data Selection: 处理部分导入的情况, 如图 2.28 所示。

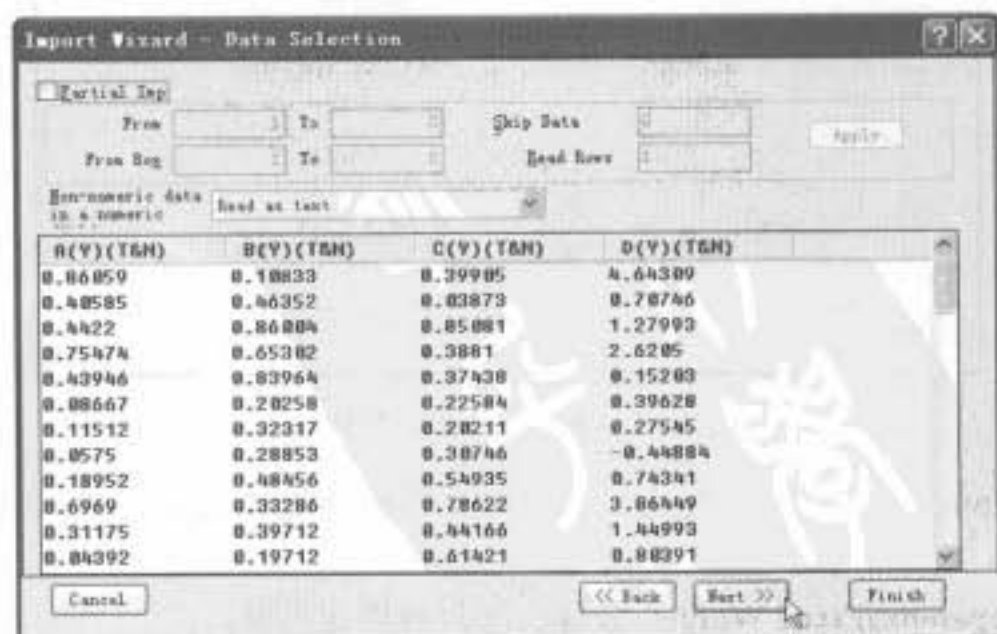


图 2.28 导入向导界面: 部分导入

(6) Save Filters: 保存过滤器, 即在运行这个向导时的所用参数。这样就无需为同一种数据来源反复的进行参数设置, 相当于使用数据导入模板, 可以大大节省时间。

1) Save Filter: 选中这个选项, 确定过滤器保存的位置, 默认的是 Origin 定义的一个目录, 即所有自定义过滤器(模板)保存的位置, 以后要用到这个过滤器时就不用到处寻找。其他选项包括将过滤器保存在数据源同一目录或数据窗口中。

2) Filter Description: 过滤器描述, 即说明备注。

3) Filter File Name: 为过滤器命名, 扩展名为 (.OIF)。

4) Specify Associated Data File Names to which This Filter Will Be Associated: 本过滤器希望与什么样的数据文件(扩展名)配合使用, 默认为 *.dat 和 *.txt。

5) Specify Advanced Filter Options: 指定过滤器高级选项。可用脚本语言对数据进一步处理和数据文件拖放方式导入的处理, 如图 2.29 所示。

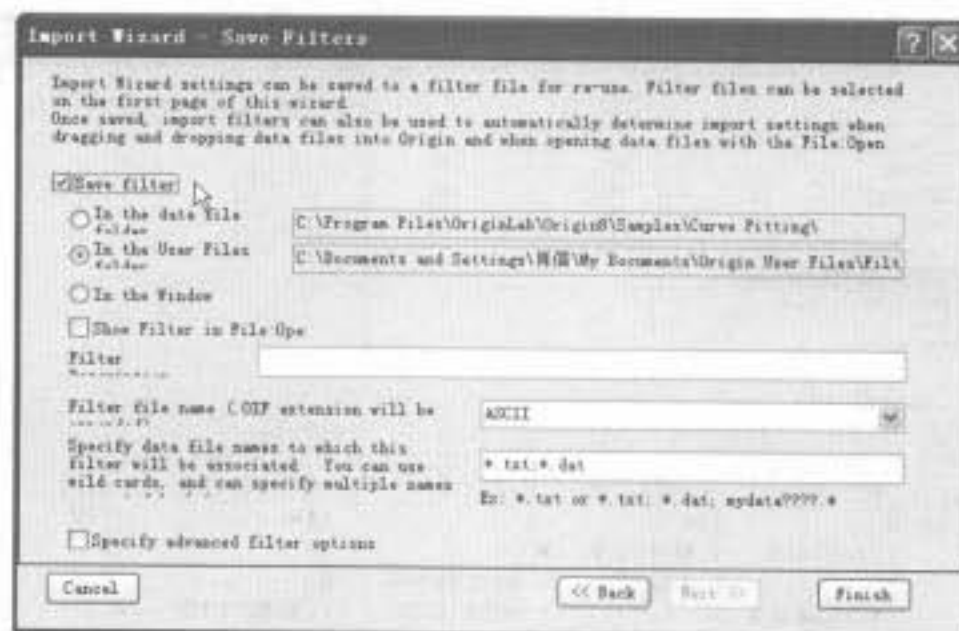


图 2.29 导入向导界面: 保存过滤器

如果希望导入数据后直接作图, 可以新建 Graph 图形窗口后才执行数据导入向导, 这样将会即时地产生对应的图形。

2. Binary 导入选项

如果在向导的第一个对话框的数据类型选择 Binary(二进制类型), 则参数设置有所不同, 因为二进制文件的范围很广, 格式多变, 导入时需要定义特定的数据结构, 如图 2.30 所示。

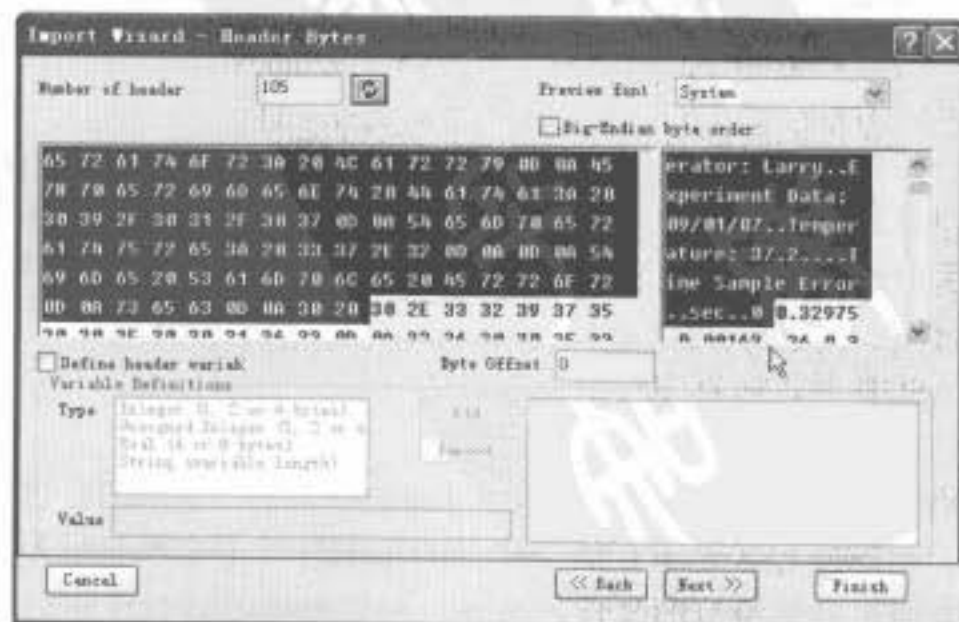


图 2.30 导入向导界面: 导入二进制文件

(1) Header Bytes: 文件头处理。

1) Number of header bytes: 确定文件头所占的字节数。文件头中的信息虽然有用, 但与实际数据无关, 因此要扣除。利用鼠标在两个不同编码显示的区域进行选择, 左边是十六进制编码右边是 ASCII 编码, 两者会相互对应。这个功能是为了尽量显示二进制文件中的有效信息以便确定文件头与实际数据的分界点。

2) Preview font: 选择字体以尽量显示清楚。

3) Byte Offset: 偏移量, 即当前字符相对于开头是在什么位置。

(2) Data Pattern: 数据结构。本部分是核心设置。在这里定义数据文件中每一条记录 (Record) 的数据结构 (即构成和数据类型)。如图 2.31 所示, 在 Pattern 中进行定义。

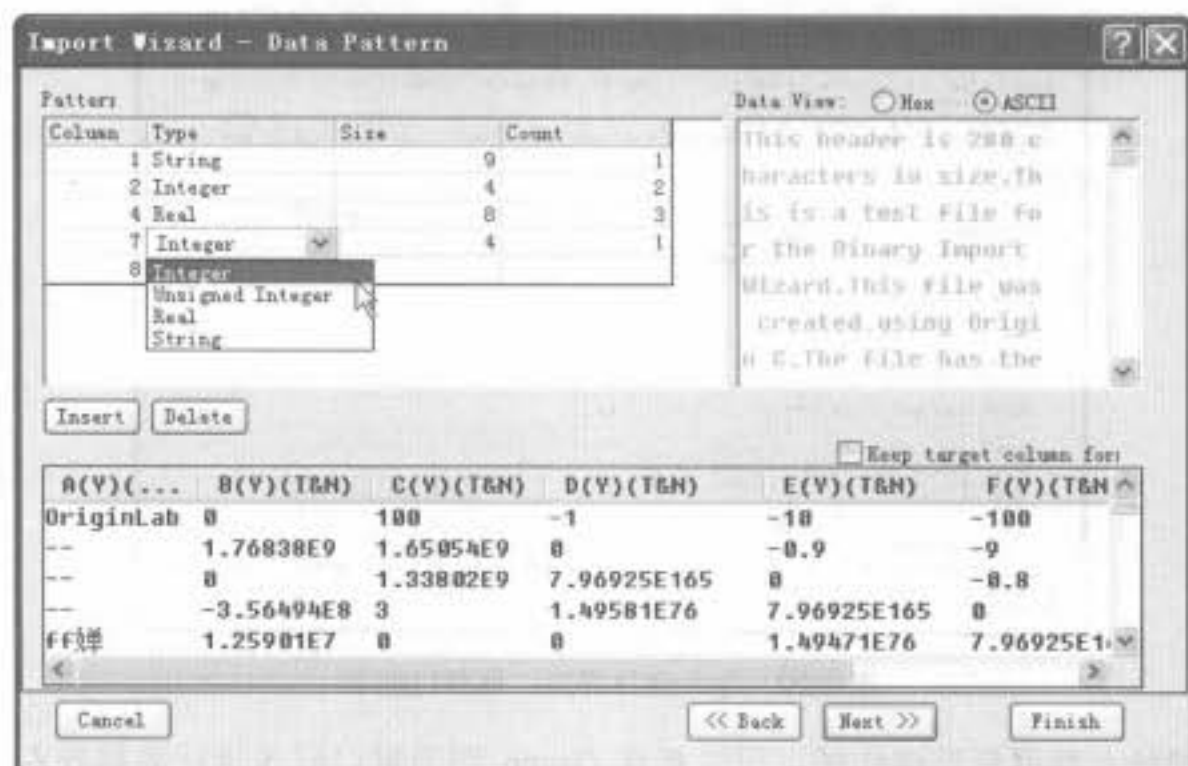


图 2.31 导入向导界面: 二进制文件数据结构

1) Type: 类型。有四种选择分别是 Integer (整数型)、Unsigned Integer (没有正负号的整数)、Real (实数, 即有小数点的数) 和 String (字符型)。

2) Size: 占用字节数。对应 Integer 和 Unsigned Integer 自动分配 4 个字节、Real 自动分配 8 个字节, String 字符型需要自己定义字节数量。

3) Count: 数量, 个数。

4) 上图所示例子的说明: 本例每条记录中第 1 个值是字符串 (String), 最长占有 9 个字符 (Size=9), 数量为 1 (Count=1); 接着是两个整数数值 (Count=2), 然后是 3 个实数 (Count=3), 最后是 1 个整数。后面的值又会重复前面的记录。

5) 最终的结果会在 Preview 窗口看到。

其他对话框与 ASCII 导入时基本一致。

3. Clipboard 导入选项

如果在向导的第一个对话框中选择数据源 (Data Source) 为粘贴板 (Clipboard), 则会进入粘贴板导入选项。粘贴板导入对于在同一平台的不同软件中交换数据是很重要的。粘贴板导入与文件导入很类似, 只是没有源文件, 另外, 粘贴板导入只允许使用 ASCII 码数据, 如图 2.32 所示。

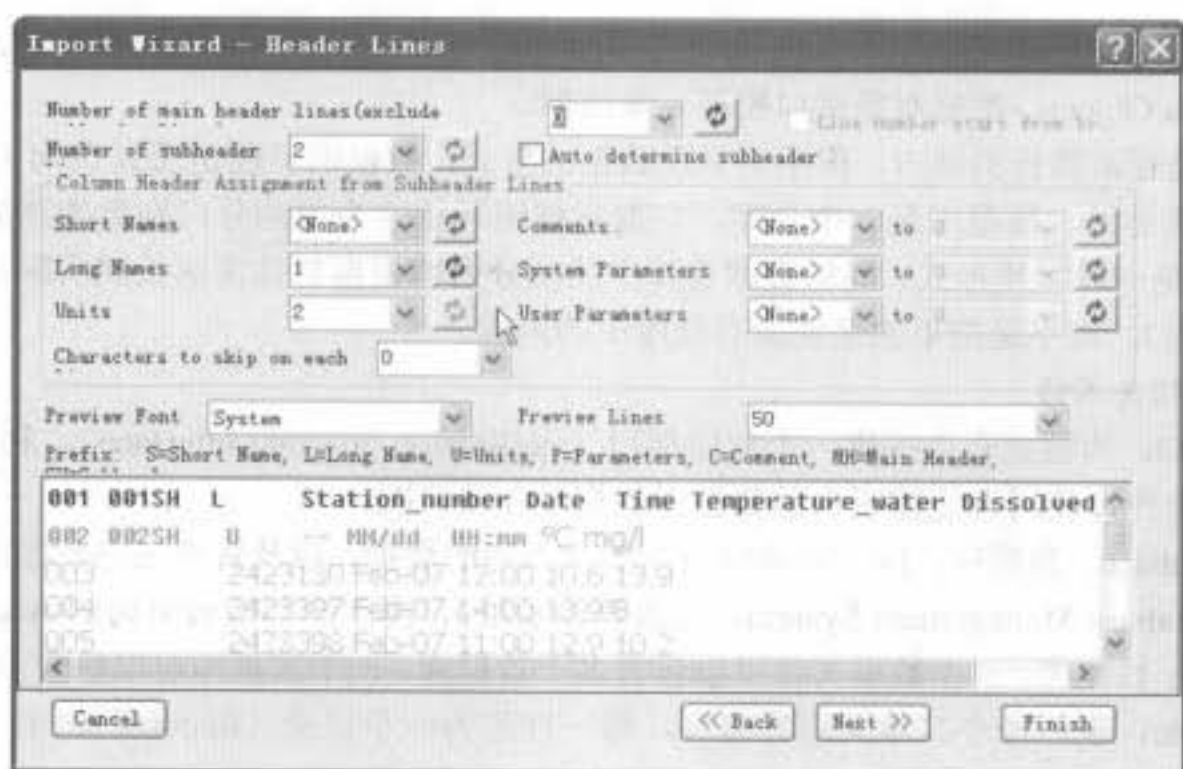


图 2.32 导入向导界面：粘贴板数据导入

(1) Header Lines: 表头定义, 如图 2.33 所示。

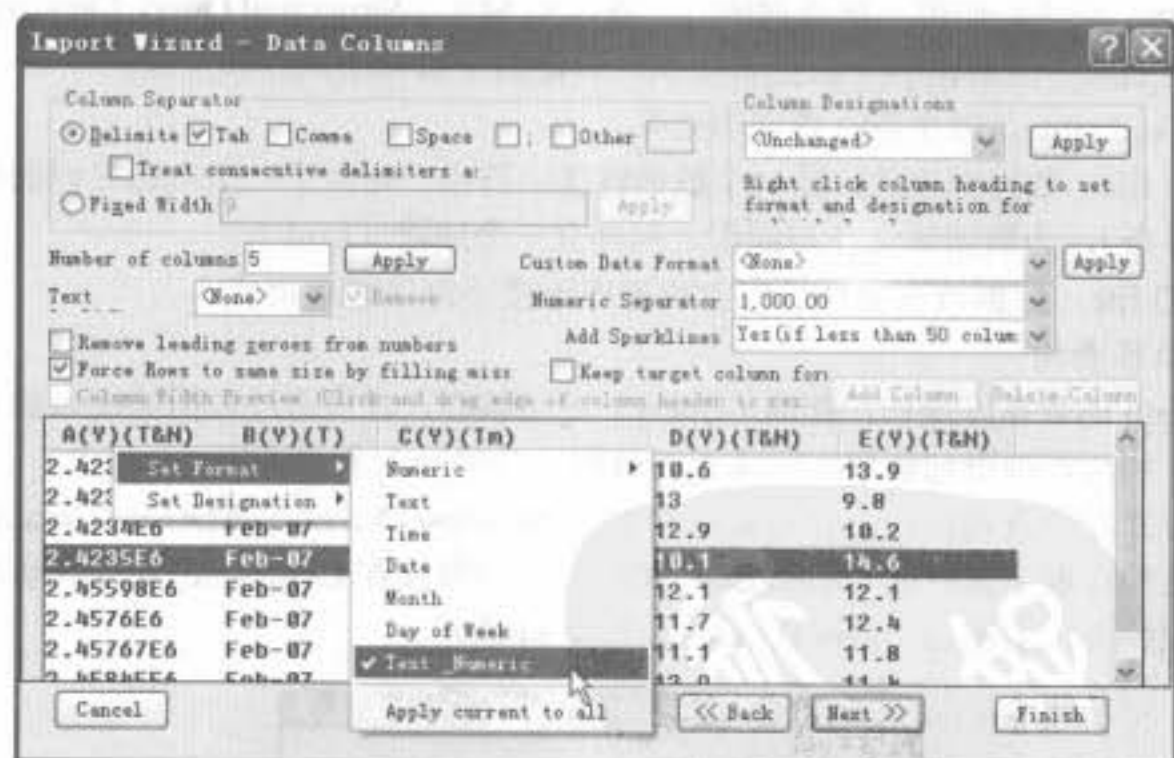


图 2.33 导入向导界面：数据列设置

(2) Data Columns: 数据列定义。特别注意日期和时间的格式定义, 因为如果没有定义, 会当成数值 (根据年月日计算出来的整数) 读入。

其他对话框选项与 ASCII 导入时基本一致。

2.2.3 数据库格式导入

一个数据库 (Database) 就是一大堆数据根据一定原则组织在一起的数据文件。其范围相当广泛, 从小型的关系型数据库 Access、FoxPro, 到大型的数据库系统如 SQL Server、Oracle, 以至于所有支持 ODBC (开放式数据库接口) 协议的数据源 (如 Excel、XML 等)。

这些数据库文件都可以在 Windows 平台中集中地使用一个通用的数据库接口,称为 ADO (ActiveX Data Object, 数据对象接口模型) 来访问。

数据库是存放数据的地方,但不是呈现数据的方式,数据的呈现是通过查询 (Query) 来实现的。也就是说,数据库是一个仓库,它通常按照其属性为原则分门别类的摆放 (物理结构),而查询是一种呈现形式,即将数据仓库中的部分内容根据具体需求按照实际情况进行摆设 (逻辑结构),而不是简单的呈现原有仓库中的内容。

1. ADO 相关术语

(1) ADO: 为数据存取提供一个程序接口 (application program interface), 利用 ADO 模型进行数据操作, 使用者无需明白源数据库的物理存储情况。

(2) Database, 数据库: 按一定规则组织的一系列的数据, 以及管理这些数据的控制系统 (DBMS, Database Management System, 数据管理系统), 典型的如微软公司的 Access 数据库和 SQL Server 数据库。一个数据文件可以包含多个数据库, 一个数据库可以包含多个数据表。

(3) Table, 表: 一个二维关系数据表, 每一行称为一个记录 (Records), 第一列对应一个字段 (Fields)。

(4) Records, 记录: 表中的每个行称为一个记录, 每个记录包含多个字段。

(5) Fields, 字段: 每个列对应一个字段, 同一字段的记录具有相同的数据类型和限制。

(6) Query, 查询: 使用一种查询语言, 通常是 SQL (Structured Query Language, 结构查询语言) 对数据库中的数据的一次重新组织, 以便用于具体的操作和呈现。

(7) Derived table, 派生表: 查询的结果。

(8) ODS file, 数据源文件: 是一个数据链接字符串, 相当于一个电话号码的使用 (当然比电话号码复杂), 为数据库文件与应用之间建立一个连接 (Link)。

(9) ODQ file, 数据查询文件: 包含数据库连接字符串和查询式。

2. 建立数据查询

对于 Origin 的数据库操作, 查询 (Query) 才是核心, 查询通过数据连接串建立与具体数据库的连接, 利用查询语句获取实际需要的数据, 最终导入到 Origin 中。

有三种方式打个查询设计, 分别是打开 File: Database Access (ADO): Create/Edit Query 菜单、单击数据存取工具栏的 Create/Edit SQL 按钮和直接在 Command 窗口中输入 dbEdit 指令。打开数据库查询编辑器 Query Builder 如图 2.34 所示。



图 2.34 数据库查询生成器

设计查询的首要任务是建立数据链接串。方法是单击 Query Builder 窗口的 Query: Data Source: New 菜单项, 即新建立数据连接。出现数据链接对话框后有多种建立链接串的选择, 其中最简单的是选择“提供程序”, 然后选择对应的数据源。以 Origin 提供的一个 Access 数据库作为例子 (源文件路径: C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Import and Export\stars.mdb)。则“提供程序”选择“Jet 4.0 OLE DB Provider”。

单击下一步后即选择“连接源”, 本例为单击鼠标所在按钮选择 stars.mdb 文件。如果源数据库有密码则要填写密码, 如图 2.35 和图 2.36 所示。



图 2.35 数据链接属性

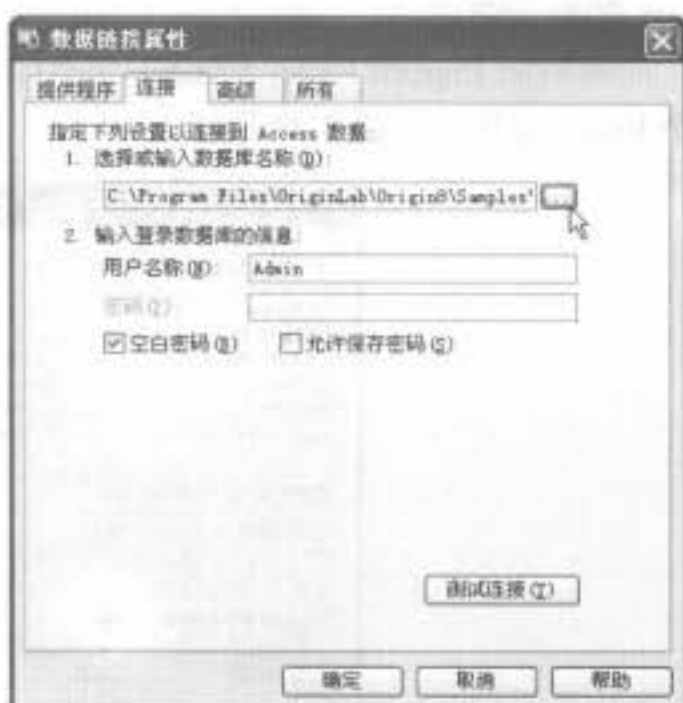


图 2.36 打开数据库文件

如果数据库链接正确 (即数据库类型选择正确并能找到源文件), Query Builder 界面将如图 2.37 所示。



图 2.37 查询结果

通过鼠标选择相应的字段和数据表并设置条件建立查询, 然后单击 Preview 按钮即可以预览查询结果, 单击 Import 按钮完成导入。

查询语句和数据链接串可以保存或加载，以方便下次使用。

关于数据库、数据表的建立、维护和 SQL 查询语法，请自行参阅相关书籍。

2.2.4 其他格式导入

1. Excel 格式数据导入

Origin 软件能够与 Excel 很好的集成工作，具体参见 2.3 节内容。不过，这种集成，一般只用于作图相关过程，如果希望利用 Origin 提供的各种数据分析功能，则需要将数据导入到 Origin 的电子表中。

选择 File: Import: Excel (XLS) 菜单即可打开 Excel 文件导入对话框，然后添加一个或若干个 Excel 文件，如图 2.38 所示。

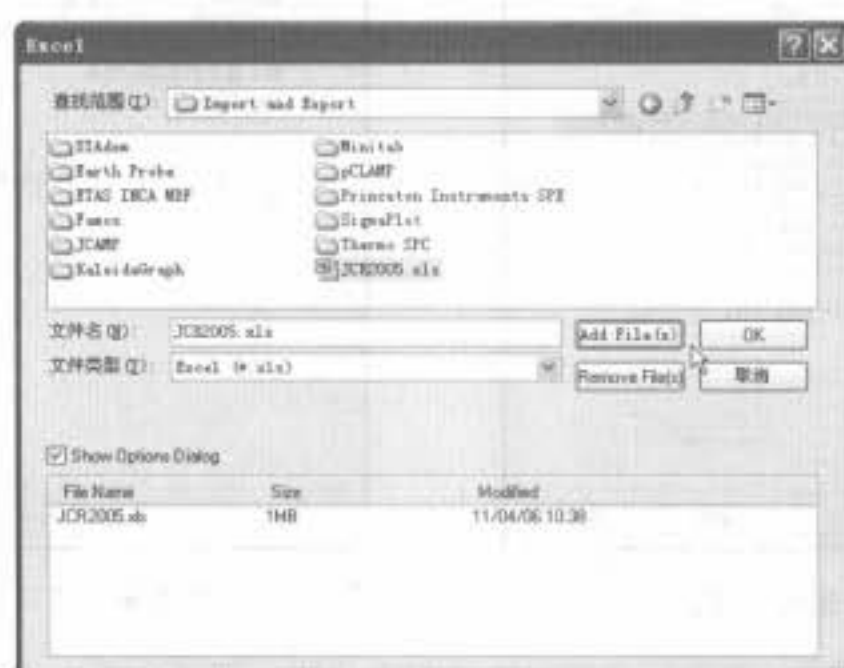


图 2.38 导入 Excel 格式文件

如果希望详细设置 Excel 文件的导入参数，则选择上面对话框中的“Show Options Dialog”选项，会打开如图 2.39 所示对话框。

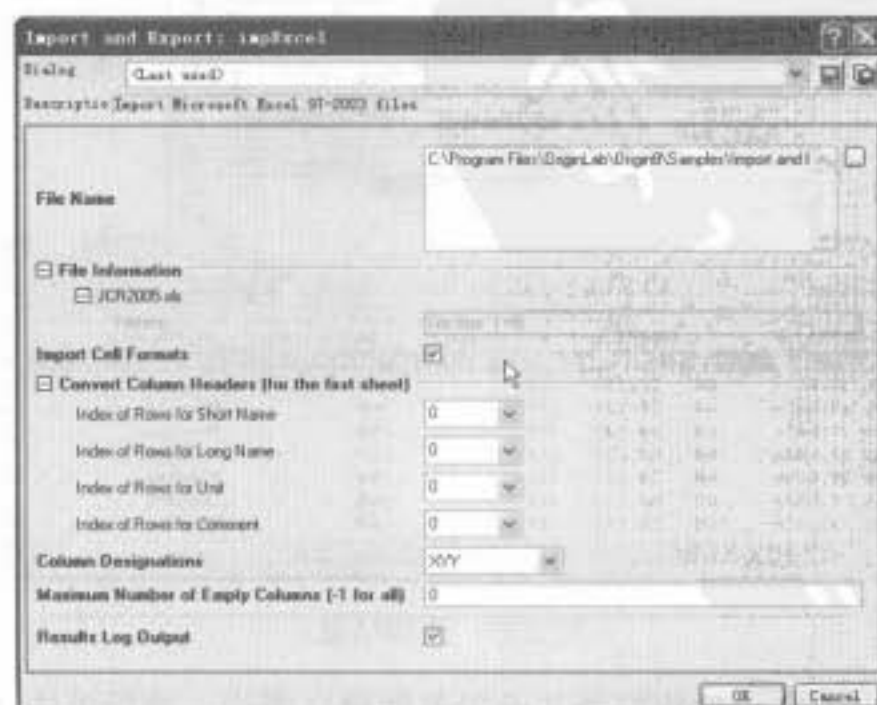


图 2.39 Excel 导入设置

导入 Excel 文件的参数比较简单,主要还是设置表头和列定义。从上面对话框中也可以看到,Origin 提供了对 Excel 单元格格式的兼容 (Import Cell Formats)。单击 OK 按钮导入完成,由于新版本的 Origin 提供了多表工作簿,因此导入后的样式与原来 Excel 表基本一致,非常方便。

不过要注意的是,Excel 的单元格如果使用的是公式,则 Origin 自动处理成对应的数值(即不保留公式),所以导入的方式会失去一些 Excel 的特性。

2. 第三方软件数据格式导入

所谓第三方数据文件 (Third Party Files) 指的是 Origin 支持的一些软件的专用格式 (不需要用原来的软件打开再导出为 ASCII 格式)。这种外部文件的导入是基于 X-Function 函数的,这意味着可以自行扩展。

Origin 内部支持的第三方数据格式及其对应的 X-Function 见表 2.6。

表 2.6 第三方数据文件格式及对应 X-Function

File Type (Extension)	X-Function Name
Data Translation (DCF, HPF)	impDT
EarthProbe (EPA)	impEP
Famos (DAT, RAW)	impFamos
ETAS INCA MDF (DAT, MDF)	impMDF
JCAMP-DX (DX, DX1, JDX, JCM)	impJCAMP
KaleidaGraph (QDA)	impKG
MATLAB (Mat)	impMatlab
Minitab (MTW, MPJ)	impMNTB
NetCDF (NC)	impNetCDF
NI DIAdem (DAT)	impNIDIAdem
NI TDM (TDM)	impNITDM
pCLAMP (ABF, DAT) *	imppClamp
Princeton Instruments (SPE)	impSPE
SigmaPlot (JNB)	impJNB
Sound (WAV) *	impWav
Thermo (SPC, CGM)	impSPC

对于普通用户来说,只要知道哪些软件的格式是 Origin 支持的,再选择相应的菜单命令 (File: Import: 格式名称) 即可。要注意的是,由于不同的文件格式其参数是不同的,因此每个 X-Function 对话框中的参数也各异,在导入时要适当的设置,具体的也可以参考对应 X-Function 提供的帮助,如图 2.40 所示。

Origin 在其安装目录下 (通常为 C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Import and Export) 提供了各种格式文件可以方便地进行导入练习。



图 2.40 导入 pCLAMP 格式文件

2.2.5 拖放式导入

拖放即将源文件用鼠标拖到目标软件界面后再放开，然后由软件“智能”的进行相应的处理，这在 Windows 平台中是很方便的操作方式，Origin 软件也支持拖放功能。

1. 拖放的位置

如果希望直接将数据文件通过拖放的方式导入到 Origin 中，那么可以有三种方式：①在 Origin 窗口没有激活前将数据文件拖到 Windows 任务栏中 Origin 软件的位置；②将文件拖放到 Origin 的工程项目管理器 Project Explorer 中；③将文件拖放到 Origin 工作空间的空白处，如果拖到工作簿则处理数据导入，如果拖到图形窗口则处理作图（同时也会完成数据导入）。

2. 处理的程序

当一个或多个文件被拖到 Origin 软件中，其处理过程是：Origin 调用一个内部文件判别模块，根据要导入的文件扩展名来决定调用的哪一个过滤器（Import Filter .OIF）；这些过滤器包括三大类：一类是 ASCII 码文件等内部过滤器，二类是 Origin 支持的第三方文件过滤器，三类是用户自己定义的自定义过滤器。

如果软件确定了过滤器的类型，则系统调用相关的过滤器实现导入，如果同一数据类型有多种过滤器合适，则出现对话框进行选择，如果没有一种过滤器合适，则会自动打开导入向导 Import Wizard 让用户自己设置参数，如图 2.41 所示。

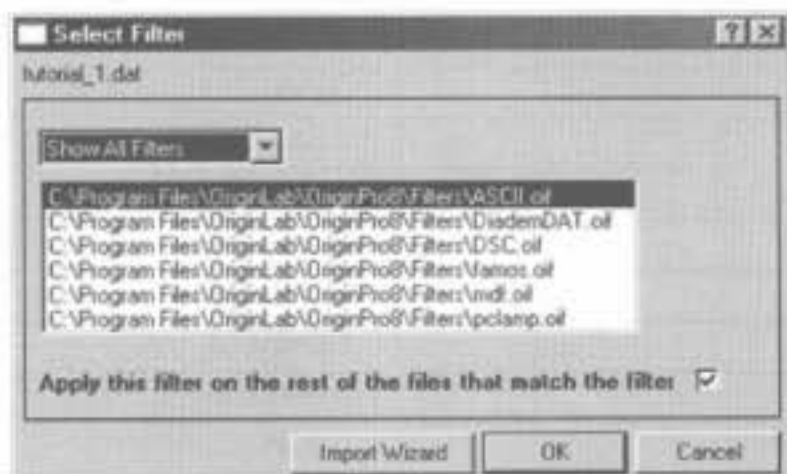


图 2.41 选择数据导入过滤器

3. 导入位置

有三类窗口用于导入数据：

（1）工作簿 Workbook：直接导入到当前工作表中，如果工作表中已经有数据，则会被取代（Import Mode 的默认选项为覆盖）；

（2）矩阵 Matrix：Matrix 主要存放三维数据（包括一些专用格式）和图像；

（3）图形窗口 Graph：将数据文件直接拖到图形窗口中，首先通过过滤器进行导入，然后就会自动生成曲线图，生成曲线图的同时会生成一个隐藏的工作簿文件（可以在 Project Explorer 中管理）。

对于自定义过滤器（即通过导入向导设置后再保存为过滤器），在最后一个对话框中可以通过 Advanced Options 来设置对拖放处理的参数。

对于直接作图，每次加一个数据文件，则会追加数据曲线，也即如果在同一个图形窗口中不断追加数据，则曲线会不断增加。

2.3 Excel 集成

作为优势互补, Origin 提供与微软公司被广泛使用的 Excel 软件的一种集成接口。

利用这种功能互补有两种方式:一种是将 Excel 的数据导入到 Origin 中,这相当于将 Excel 作为数据文件使用,上节中已经有较详细的介绍。另一种是采用 OLE 技术,在 Origin 内部直接嵌入集成 Excel,即将 Excel 作为工作簿,这相当于整合两种软件的功能,可以根据 Excel 的数据利用 Origin 进行作图和分析。

除此之外,其实还有第三种方式,即将两个软件分开使用,利用 Excel 的公式、函数、自动化,然后再利用 Origin 的作图和分析功能。

本节只讨论两者的整合功能,利用 Excel 数据作图的部分将会在下一章加以讨论。

2.3.1 在 Origin 中使用 Excel

1. 调用和导入的优缺点

对于保存在 Excel 中的数据,Origin 提供了两种利用方法,分别是数据导入和调用 Excel 软件。

数据导入的最大优点是能够充分利用 Origin 的所有功能,就像这些数据是一开始就是保存在 Origin 的工作簿中一样。其主要缺点是不能充分利用 Excel 软件的功能,导入后所有与 Origin 不兼容的特性会消失,例如在 Excel 中使用公式会直接计算成数值而不是保留原有公式。



调用即在 Origin 内部嵌入 Excel 软件,采用的是一种称为 OLE (Object Linking and Embedding, 对象链接和嵌入) 的技术,即以 Origin 软件作为一个容器,放入一个 Excel 软件的实例。

OLE 方式的优点包括两个:一是可以完整的利用 Excel 软件的功能,例如保留公式、函数、引用、格式设置等,当然也保留了所有 Excel 菜单和工具栏提供的功能,甚至也支持 Excel 中的宏(即自动化);另一个好处是不会破坏原有 Excel 表格,但可以动态更新其数据,这样这个 Excel 表可以在没有 Origin 软件的地方使用和共享。

OLE 调用支持两种情况,一种称为 Linking 即链接,这样 Excel 文件将保存在外部,好处当然是可以复制到其他地方使用,缺点是当该文件丢失或移位后,Origin 项目文件不能够保证其完整性;另一种称为 Embedding 即嵌入,即将 Excel 文件保存在项目内部,这样就可以保证项目文件的完整。Origin 同时支持这两种特性,具体的使用要根据用户的具体需要。

OLE 的主要缺点是由于数据实际上是由 Excel 软件控制的,Origin 对此的控制能力有限,因此如果 Excel 中的数据发生了变化,要及时通知 Origin 软件(Update)。此外 Origin 的数据处理功能对 Excel 表中的数据也无能为力。当然,如果已经使用 Origin 对 Excel 中的数据进行作图,则基于图形的分析,Origin 提供了全部的功能而不会因为用的是 Excel 数据而受影响。

2. 界面的变化

可以通过新建或打开的方法在 Origin 中嵌入 Excel 表。新建的方法是使用 File:New 菜单然后选择 Excel,或直接单击标准工具栏New Excel 按钮。打开的方法是使用 File:Open Excel 菜单或单击 Open Excel按钮然后选择一个 Excel 文件。结果出现如图 2.42 所示的界面。

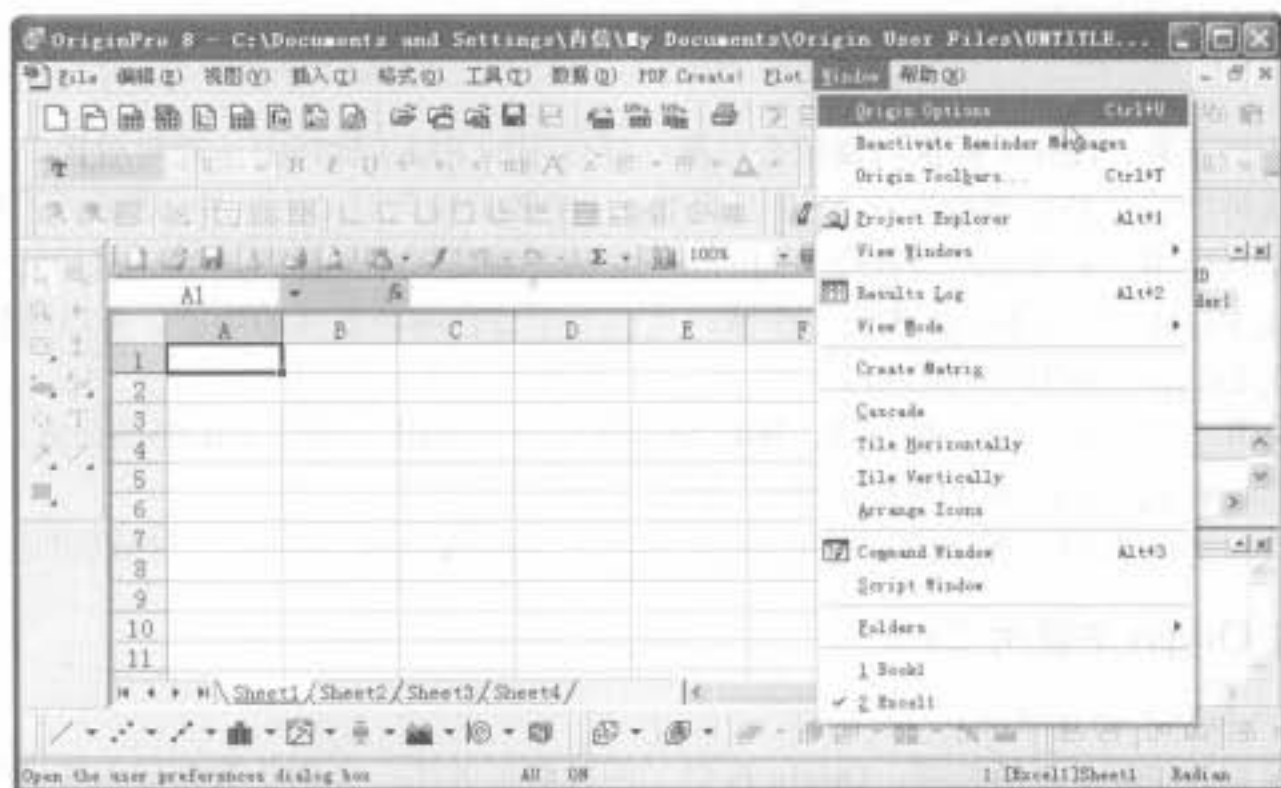


图 2.42 在 Origin 中集成 Excel

从上面的界面可见：

(1) 菜单栏集合了 Origin 和 Excel 的菜单，其中 Origin 的菜单中保留三个主菜单，分别是 File 文件菜单用于文件管理、Plot 菜单用于对 Excel 的数据作图和 Window 菜单。此时的 Windows 菜单与 Origin 的 Window 菜单不同，其内容包含了除 File 和 Plot 菜单外，能够应用于当前情况下的功能，例如可以 Origin 工具栏和打开 Command 命令窗口。

(2) 工具栏还是原来 Origin 的工具栏，但一些功能如“新建列”等按钮不能使用，一些工具栏如格式工具栏等也不能使用。然后在原来的工作空间 (Workplace) 中出现了 Excel 软件，包括 Excel 的工具栏和电子表格。

由于当前电子表格完全由 Excel 软件控制，那么如果 Excel 电子表格的数据发生了变化，甚至某个工作表被删除了，Origin 如何才能清楚这些变化呢？这就要用到 Origin 专门的快捷菜单，方法是用鼠标右键单击 Excel 窗口标题栏（如果窗口没有最大化可以直接单击标题栏，如果窗口最大化，则要单击整个 Origin 窗口的标题栏），会出现如下快捷菜单，单击“Update Origin”用于通知 Origin 有关 Excel 表格的最新情况，如图 2.43 所示。

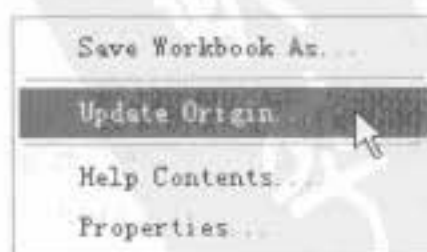


图 2.43 通过右键快捷菜单通知 Origin 关于 Excel 数据发生了变化

要注意的是，以上所有情况只有当 Excel 工作簿出现和激活条件下的情况，用户仍然可以利用项目管理器 Project Explorer 随时管理其他的电子表或图形窗口。如果当前窗口不是 Excel 窗口，窗口、菜单和工具栏的布局将会因子窗口类型而改变，因此可以把 Excel 窗口理解为一种特殊的 Origin Workbook 工作簿子窗口。

3. Excel 文件管理

上面讨论过 Excel 文件与 Origin 有两种关系，一种是外部文件的链接关系，一种是内部文件的嵌入关系。由于这两种情况各有利弊，因此用户要自己进行选择。

对于新建立的 Excel 表，打开 Origin 用于 Excel 窗口的快捷菜单，然后选择 Properties 属性，打开如图 2.44 所示的对话框。

在 Save As 选项进行选择，如果选择 Internal 则 Excel 文件保存在项目内部（保存 Origin.OPJ 文件时同时保存），这是默认选项；如果选择 External 则表示希望以单独的 Excel 文件保存在外部（默认为保存在工程项目文件同一文件夹下），另外可选择 Update Automatical 自动更新选项，保持在 Origin 操作后 Excel 文件的数据能同步更新。

对于外部 Excel 文件，如果源文件丢失，则会出错，需要用户重新指定文件位置，如果不要该文件，可以选择 Ignore 忽略或 Ignore All 忽略全部。

如果希望一个内部的 Excel 窗口保存为了一个外部文件，则选择快捷菜单的 Save Workbook as..命令。

如果希望更详细地对 Excel 表进行更详细的设置，可以打开 Window 菜单中的 Origin Options 选项，在 Excel 页中可以进行如图 2.45 所示的设置。

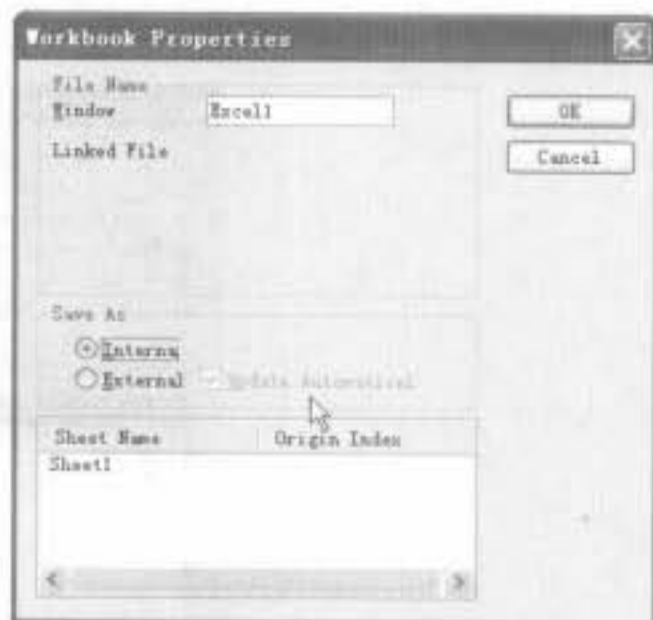


图 2.44 Excel 工作簿属性

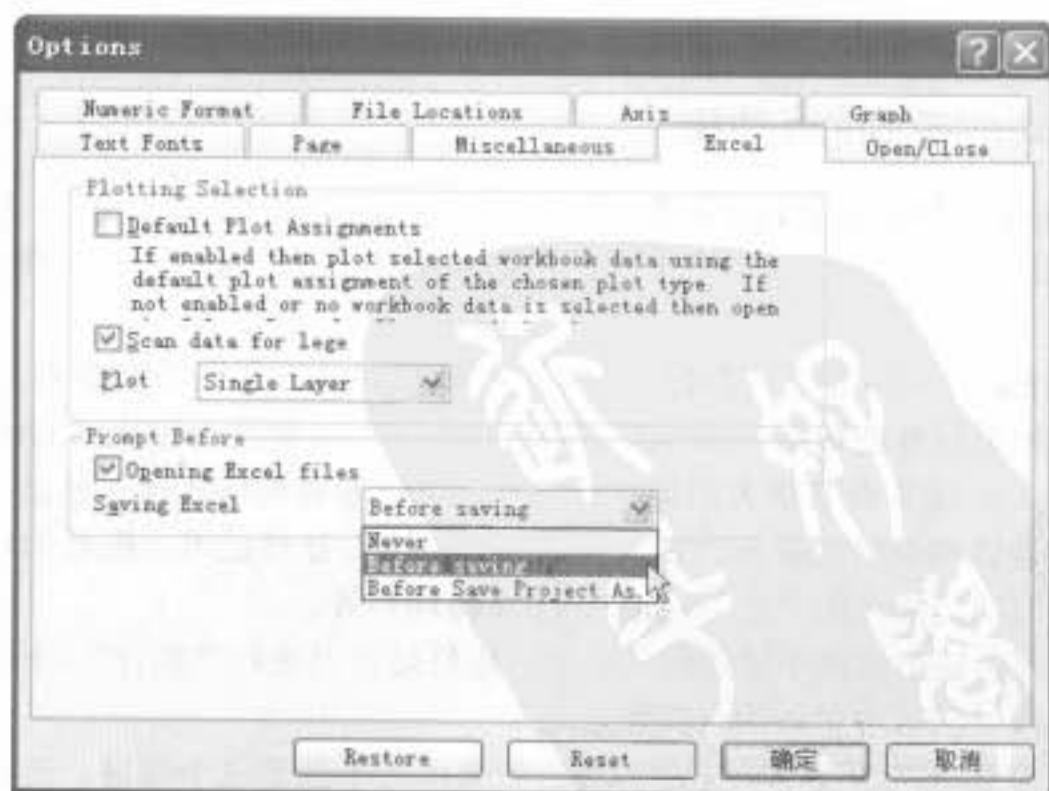


图 2.45 Origin 中的 Excel 设置

4. Excel 表格管理

Excel 表格管理及与 Origin 软件的交互主要包含以下操作：

(1) 重命名工作簿：用鼠标右键单击 Excel 工作簿的标题栏打开快捷菜单选择 Properties 属性项，直接输入新的表名。

(2) 重命名工作表：直接在 Excel 表中操作。

要注意的是，如果该表已经与某个图形建立了数据关系，重命名工作表可以会引起对应图形出现问题，因此重命名后要重新建立这种链接。方法是在快捷菜单中使用 Update Origin，出现 Associate Excel Worksheet 对话框，选择新的表名即可，如图 2.46 所示。

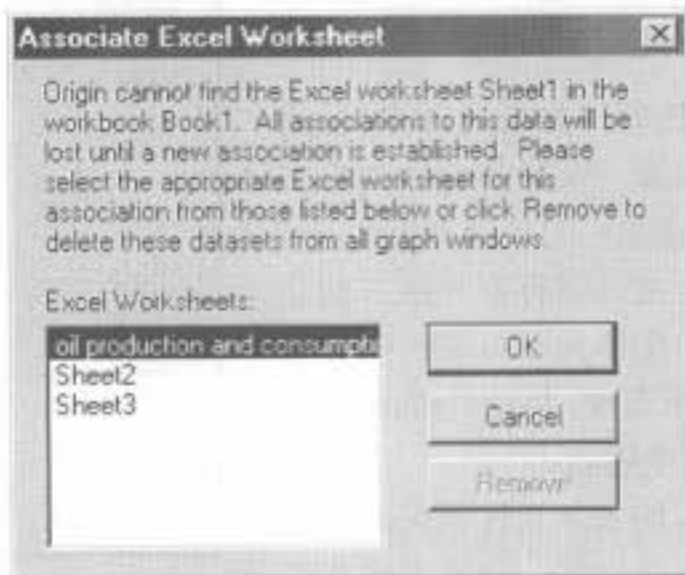


图 2.46 Excel 表格管理

(3) 删除工作表：在 Excel 中用鼠标操作即可，与重命名工作表一样，要注意数据与图形的对应关系。单击 Update Origin 打开 Associate Excel Worksheet 对话框处理。

(4) 建立矩阵：选中整个工作表，打开 Window>Create Matrix 菜单，利用 Excel 表格建立矩阵数据，关于矩阵，三维作图部分会再讨论。

(5) 运行 Excel 宏/调用 VBA：需要使用 LabTalk 语言运行指令，有一定的复杂性。

2.3.2 整合 Excel 与 Origin 功能

Excel 与 Origin 比较，Excel 的优势是应用广泛使用方便，因此已经被大量的使用来做数据管理和数据运算软件，而 Origin 的优势是作图和数据分析，这两个方面确实是 Excel 所无法取代的。

那么原来在 Excel 中的数据是否有必要全部转换成 Origin 呢？答案是否定的。

笔者认为，如果原有的数据在 Excel 中运作良好，不需要急于转换成 Origin 电子表格。其主要原因是 Excel 确实有其极大的优势，包括：广泛兼容的格式导入导出、丰富的各种领域的函数、数据运算和引用的灵活性、大量的“智能化”处理技术、极好的软件操作习惯支持，以及简单的但功能强大的“宏”功能（VBA 编程）等。

事实上，没有必要把这两个软件对立起来，最好是自己进行“整合”。下面以一个固液吸附动力学的例子来说明这种整合的合理性。

这个例子比较复杂，涉及学科专业知识，如果读者不熟悉这个领域，请不要管下面的那些公式，只要了解使用 Excel 的优点及与如何与 Origin 软件协作即可。

1. 例子背景

离子交换与吸附行为是发生在固—液两相界面的一种普遍但复杂的现象，涉及多种的物理和化学作用。为了探讨固—液吸附动力学及其反应机理，设计一个实验，利用电位分析法结合离子选择性电极跟踪吸附体系中离子浓度的变化情况。

因此实验得到的实验数据包含两个变量，一个是时间作为自变量，另一个是随时间不断变化的离子浓度作为因变量。对于具体的实验因为跟踪的是氢离子的浓度，实际上就是获取反应体系作用过程中的 pH 值变化。

2. 用到的公式和数据换算方法

动力学研究主要涉及动力学模型的选择和计算，本实验实际所用到的公式包括：

(1) 浓度与 pH 值的换算： $C_t = 10^{-\text{pH}}$ ， C_t 代表 t 时刻浓度。

(2) 吸附分率的计算： $\alpha_t = (C_0 - C_t)/C_0$ ， C_0 表示起始浓度。

(3) 表观吸附速率常数、平衡吸附量、平衡吸附分率的计算：

从质量定律出发，遵循单分子层吸附机理推导出固-液界面吸附的动力学方程：

$$\frac{t}{q_t} = \frac{M_{AR}}{k \cdot C_0} + \frac{t}{q_e}, \text{ 式中 } k \text{ 为表观吸附速率常数, } q_t \text{ 为 } t \text{ 时刻的吸附量, } q_e \text{ 为平衡时的吸附量,}$$

M_{AR} 为吸附剂活性基团的相对分子质量。以 t/q_t 对 t 作图应得到直线，从截距和斜率就能分别求出 k 和 q_e ，式子中下标 e 代表平衡状态。

另外，通过： $q_t = (C_0 - C_t)V/m$ 、 $q_e = (C_0 - C_e)V/m$ 、 $\alpha_t = (C_0 - C_t)/C_0$ 与 $\alpha_e = (C_0 - C_e)/C_0$ 的关系，把上式转化为另外一种线性表达式： $\frac{t}{\alpha_t} = \frac{M_{AR}}{k \cdot m} + \frac{t}{\alpha_e}$ ，式中 V 为吸附质溶液的体积，

m 为吸附剂的用量，以 t/α_t 对 t 作图应得到直线，从截距和斜率分别求得 k 与 α_e 。

(4) 覆盖度和吸附剂/吸附质相互作用能的计算：

利用固-液相互作用方程： $\frac{\theta}{1-\theta} + \ln \frac{\theta}{1-\theta} - \ln C_e = -\ln k_2 + k_1 \cdot \theta$ ，式中， θ 为覆盖度，

$\theta = \alpha_t / \alpha_e$ ， k_1 为与温度、分子协面积及吸附质分子侧向相互作用有关的无量纲常数， k_2 为固体表面与吸附质作用强度的度量， k_2 越小，表示这两者的相互作用力越大，由 k_2 可定义吸附剂/吸附质相互作用能 $U = -RT \ln k_2$ ，式中 R 为摩尔气体常数， T 为绝对温度。以 $\theta/(1-\theta) + \ln[\theta/(1-\theta)] - \ln C_e$ 对 θ 作图，从直线截距求得 k_2 和 U 。

(5) 吸附模型的选择与计算。

为了解释固-液吸附与离子交换现象，多种动力学模型被提出和引入，如假一级动力学模型、假二级动力学模型、粒内扩散动力学模型、单分子层固-液界面吸附动力学模型，以及基于分形理论的非线性吸附过程等，每种模型都有其适用的领域。检验这些模型（机理）的最佳方法是让实验数据按相应的方程式进行拟合，比较其拟合的匹配程度即相关系数，若匹配程度都很高则最可能用该理论解释，以下是用到的一些吸附模型的方程式：

$$f(\theta) = -\ln(1-\theta)$$

$$g(\theta) = 3 - 3 \cdot (1-\theta)^{2/3} - 2 \cdot \theta$$

$$h(\theta) = 1 - (1-\theta)^{1/3}$$

$$F(\theta) = \theta/(1-\theta) + \ln(\theta/(1-\theta)) - \ln(C_e)$$

$$\ln(t) = \ln(\alpha_t/(1-\alpha_t))$$

$$\ln(C_0 \cdot (1-\alpha_t)) = \ln(\theta)$$

3. Excel 数据处理流程

实验数据处理的主要流程如图 2.47 所示。

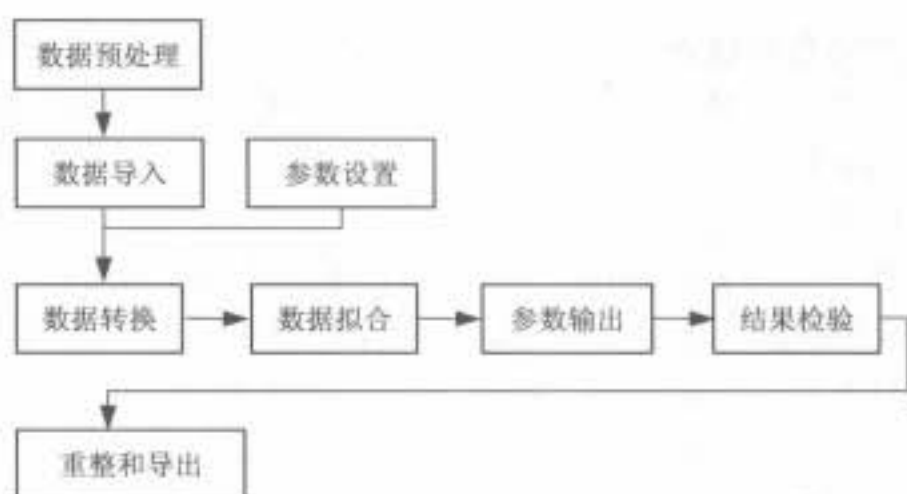


图 2.47 数据处理流程

根据上述方程式设计的 Excel 表如图 2.48 所示。

参数输入

参数输出区:

拟合与参数输出

原始数据

数据变换

重整按钮

平行实验误差

图 2.48 一个具有完整计算功能的 Excel 表格

4. 利用线性拟合公式获取动力学参数和寻找理论模型

根据上述方程式，为了求取动力学参数即表观速率常数 k ，需要以 t/α 对 t 作图应得到直线，从截距求取；另外，大部分的吸附模型是基于各种理论假设后进行数学推导的结果，最终的结果也是呈线性关系，如果线性关系相关度高，则可以使用某一模型进行解释，建立模型后，即可进一步求取各种原先假设的条件（参数）。因此，本程序需要大量应用到线性拟合（回归），即通过最小二乘法寻找最佳的截距和斜率组合。

在 Excel 中可以直接应用线性拟合函数：LINEST (known_y's,known_x's,const,stats)，其

中 Known_y's 是 y 值的集合, Known_x's 是 x 值的集合, Const 用于指定是否强制通过原点, Stats 指定是否返回附加回归统计值。

由于 LINEST 函数的返回值是数组, 而且对实际数据处理比较重要的是截距、斜率和相关系数, 因此要使用索引函数直接获取结果: INDEX(array,row_num,column_num), 其中 Array 为单元格区域或数组常量, Row_num 为数组中某行的行序号, Column_num 为数组中某列的列序号。

典型的例子如求取表观速率常数 k , 其 x 轴为时间 t , 数据位于 A25:A79, y 轴为 t/α_e , 数据位于 E25:E79。则其直线斜率=INDEX(LINEST(E25:E79,A25:A79,TRUE,TRUE),1,1), 截距=INDEX(LINEST(E25:E79,A25:A79,TRUE,TRUE),1,2), 直线的相关系数=INDEX(LINEST(E25:E79,A25:A79,TRUE,TRUE),3,1), 表观速率常数 k 可从截距与其他参数通过换算求取。

理论模型的求取主要是根据直线的相关系数 (R^2) 来判断, 如果相关系数非常接近 ± 1 , 则可以考虑该模型, 并从截距和斜率求取其他的物理量。

5. 根据匹配函数进行吸附剂/吸附质相互作用能的计算

吸附剂/吸附质相互作用能 U 的求取也是基于线性关系, 不过其推导是基于覆盖度 (θ) ≤ 0.5 的假设的, 也即只取反应前面一段加以讨论。然而, θ 什么时候达到 0.5 与反应体系有关, 反应速度越快越容易达到 50% 的覆盖度。为了实现这个目标, 程序必须根据实际情况动态的检索 $\theta=0.5$ 的数据位置, 以便选取前面的数据点。

为此, 要使用匹配函数: MATCH(lookup_value,lookup_array,match_type), 其中 Lookup_value 为需要在 Look_array 中查找的数值。Lookup_array 包含所要查找的数值的连续单元格区域, Match-type 指明在 lookup_array 中查找 lookup_value 的方式。由于是动态地址, 因此要用到间接引用函数: INDIRECT(ref_text,a1), 其中 Ref_text 为对单元格的引用, A1 指明包含在单元格 ref_text 中的引用的类型。

实际应用上 θ 在 F25:F79, $\theta/(1-\theta) + \ln[\theta/(1-\theta)] - \ln C_e$ 的值在 J25:J79, 则设立一个单元格 J12 来检索 θ 在什么时候达到 0.5=25+MATCH(0.5,F25:F79,1), 其中 25 表示从第 25 行开始, 这样即可直接得到在第几行以后 θ 超过 0.5, 则 U 相应的线性关系式的截距=INDEX(LINEST(J25:INDIRECT("J"&J12), F25:INDIRECT("F"&J12), TRUE, TRUE), 1, 2), 变换最后两位数字可求得斜率和相关系数, 从截距与其他参数的换算可求取 U 的值。

6. 利用条件格式进行结果的检验

条件格式即当数据表格中的值符合某些情况时以特别的格式显示出来, 在 Excel 中, 通过选定一系列要设置条件的区域或单元格, 然后选择“格式”菜单的“条件格式”项目设置相应的条件和格式来设定。

利用条件格式的功能, 可以很容易的实现实验处理结果的初步检验。在本文的实验数据处理中, 主要应用的地方有三处。一是回归相关系数的条件格式, 如前文所述, 相关系数影响到确定吸附机理的选取问题, 因此相当重要。为此, 设定了如果相关系数 (R^2) < 0.995 时显示为浅灰色, 因为这样达不到要求的相关度。另一处是 α_e , 即平衡吸附分率的计算值, 因为不是真正地等待反应达到吸附平衡, 而是基于理论和反应的部分数据的推导, 因此这些方程式对反应体系有一定的要求。这个要求体现在 α_e 上, 如 α_e 的值 > 1 则不能够符合真实的情况, 因此将此单元格的条件公式设定为当 > 1 时显示红色。这对具体实验是非常重要和有意义的, 这可以提示实验者重新考虑实验条件。第三处是应用在两次平行实验的相对误差上, 为了保证实验结果的可信性, 每种实验条件会做平行实验, 如果两次的结果相对误差超过 4% 则必须

再次重复实验。

7. 利用 VBA 进行结果重整和输出作图

目前 Excel 表格的所有换算和回归分析只能处理一个具体的实验结果，而为了得到反应体系的规律性，则必须不同的实验条件下，如不同的温度、吸附质浓度、外加介质环境等并放在一起加以讨论，因此有必要把电子表格中比较重要的结果进行选择性的重整。

使用 VBA for Excel 可以很容易的实现重整的功能，其方法是利用复制和粘贴方法，将需要的结果参数复制并集中到某一区域中，需要这样重整的原因是大多数软件不能够识别 Excel 中不连续的单元格。以下是一段实现把 k 、 α_e 和 U 的值整理出来的 VBA 代码。

```
Private Sub CmdCopyResult_Click()
    Range("D8").Select      '选择 k 值所在单元格
    Selection.Copy          '复制 k 值所在单元格
    Range("I16").Select     '选择 k 值目标单元格
    Selection.PasteSpecial Paste:=xlPasteValues, Operation:=xlNone, SkipBlanks:=False, Transpose:=False
    '粘贴 k 值到目标单元格

    '*****复制和粘贴  $\alpha_e$  和  $U$  值的代码类似，此处省略

    Range("I16:K16").Select '选择 3 个数值单元格区域
    Selection.Cut           '剪切数值到粘贴板中，以便其他软件使用
End Sub
```

使用相同的原理，利用 VBA 编程把实验结果整理后复制到系统粘贴板，再从内存中导入到 Origin 表格中，在 Origin 中对多次的实验结果进行组织作图，结果如图 2.49 所示。

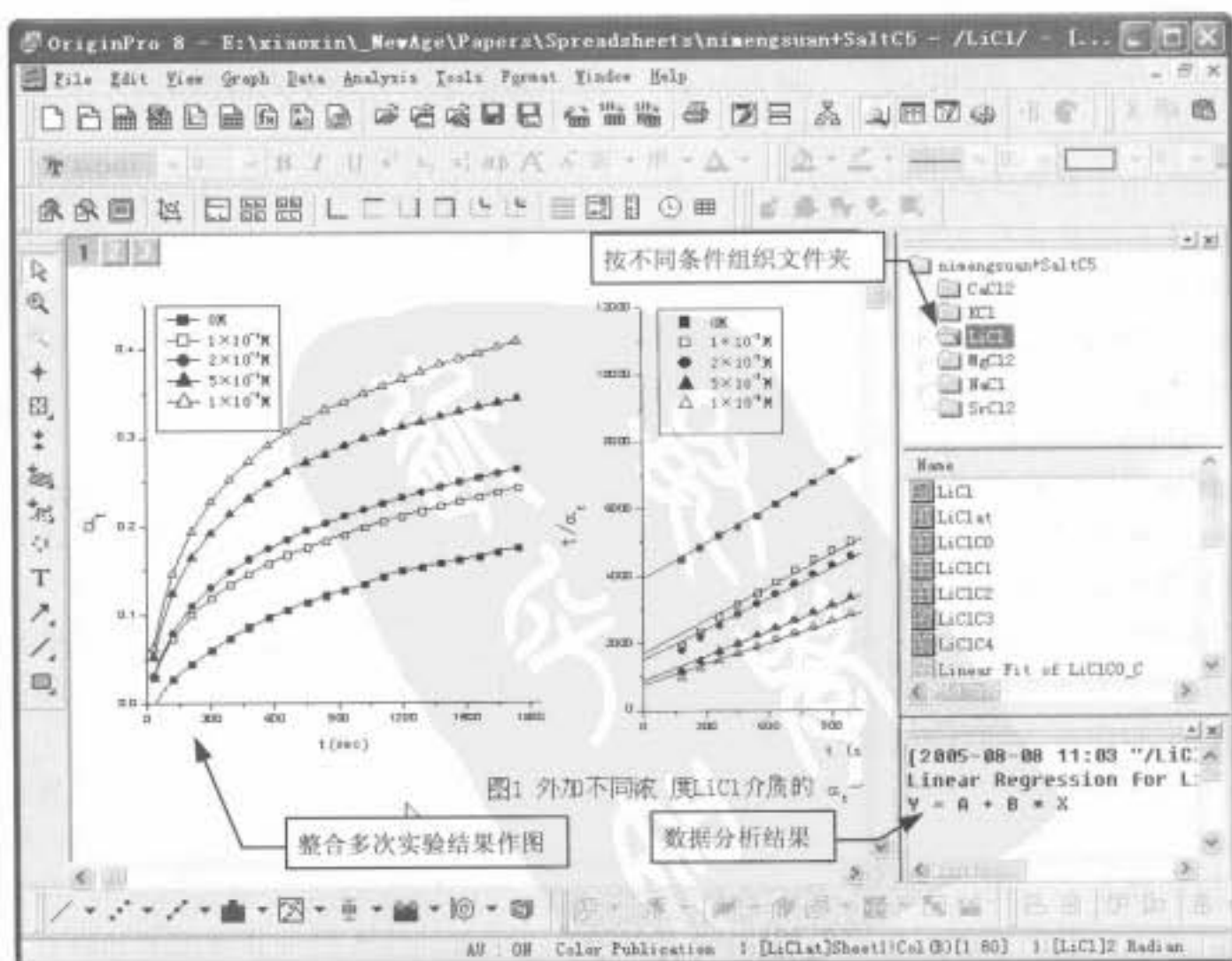


图 2.49 利用 Excel 产生的数据使用 Origin 进行作图

8. 利用替换功能实现程序的兼容性

由于本处理程序已经把数据的输入、变换、输出进行了分区，数据重整区域也与数据换算部分分开，每部分数据都有其具体明确的意义，因此剩下的问题是目前限定了原始数据的个数（组数），即如果原始数据的个数与程序的要求不一致，程序运行结果将不正确。

这主要是因为所有线性拟合和数据变换都是基于假设原始数据在第 25~79 行所致（如 t 在 A25:A79， θ 在 F25:F79），因此数据输入后少于或超过第 79 行，则所有的计算将会失去意义。

为了让程序能够适用于更多的情况，有必要对所有与数据个数有关的公式进行修订，在 Excel 中可以很容易的实现这个功能。方法是运行“编辑”菜单下的“替换”项，出现替换对话框后，打开对话框的“选项”部分，并确保“查找范围”为“公式”，然后根据实际情况，在“查找内容”中输入“79”，在“替换为”中输入最后一组原始数据的行数，单击“全部替换”按钮，即可实现所有的公式立即的变换。对于数据变换区域，如果实际数据少于第 79 行，则删除多余表格，如果数据长于 79 行，则需要通过使用填充柄将公式复制到后续的单元格中。

以上例子虽然是一个特例，但其数据处理方法具有放大的通用性和广泛适应性建议需要处理大量数据的读者仔细阅读、分析，并举一反三的利用。

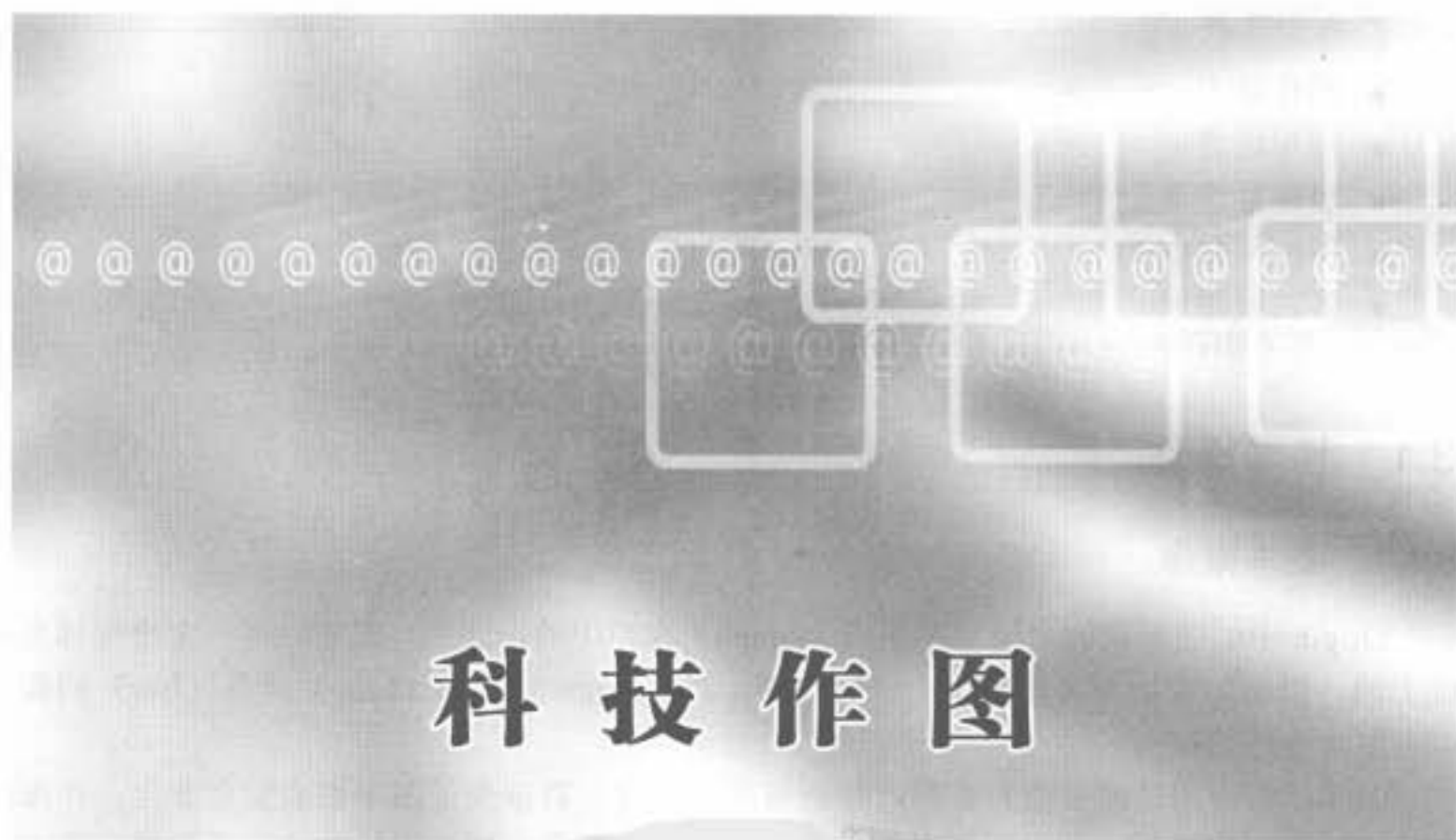
9. 结论

从上面的实例我们可以发现，Excel 其实功能也很强大，如果能够充分利用两个软件各自的特性，就可能获得更高效更强大的数据处理工具。



Part 2

第二篇



科技作图

本篇内容

- 第3章 二维作图基础
- 第4章 二维作图进阶
- 第5章 三维图形绘制
- 第6章 图形的输出和利用

新学网

本章要点

- 操作基本
- 图形设置
- 坐标轴设置
- 图例和文本
- 多曲线图形

3.1 基本操作

3.1.1 基本概念

Origin 中的图形指的是绘制在图形 (Graph) 窗口中的曲线图, 即建立在一定坐标体系基础上的, 以原始数据点为数据源——对应的, 点 (Symbol)、线 (Line) 或条 (Bar) 的简单或者复合而成的图形。

因此: ①作图之前必须有数据, 数据与图形对应, 数据变了图形也会发生变化, 作图就是数据的可视化过程; ②数据点对应着坐标体系, 也即坐标轴, 坐标轴决定了数据有特定的物理意义, 数据决定了坐标轴的刻度表现形式; ③图形的形式有很多种, 但最基本的东西仍然是点、线、条三种基本图形; ④图形可以是一条或多条曲线, 这些曲线对应着一个或多个坐标轴 (体系)。

(1) Graph (图形) 窗口。

每个 Graph 都由页面、图层、坐标轴、文本和数据相应的曲线构成, 如图 3.1 所示。

(2) Page (页面)。

每个 Graph 都包含一个编

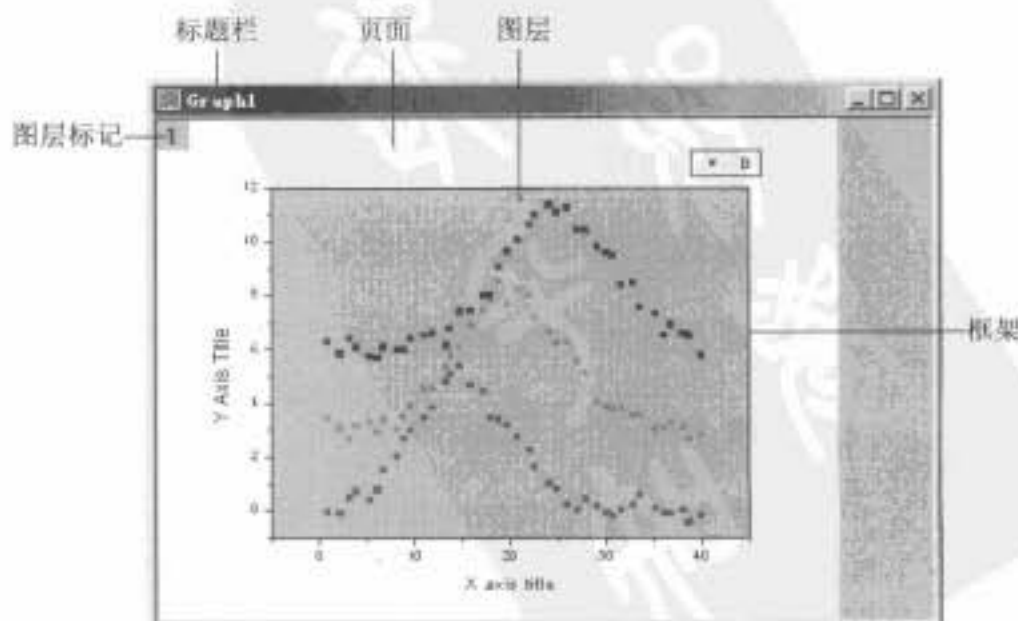


图 3.1 Origin 的 Graph 窗口

辑页面，页面作为绘图的图布，可以理解为一个绘图空间，包括图层、坐标、坐标轴、文本等几个组成部分，用户可以根据需要来修改这些内容。在页面空白处右键单击，选择 Properties（属性）命令，在弹出的对话框中可对 Graph 和 Page 的相关属性进行设置，可以设置页面的表现形式和大小等属性。

（3）Layer（图层）。

如果把页面（Page）理解为一个窗口，则图层更像一张透明纸。每个图层包括三个要素：坐标轴、数据曲线（点）以及与之相关的文本、图例。在 Graph 中最多可包含 50 个层，图层是透明的可以相互重叠，在页面的左上角以灰色的小图案标记之，图 3.1 所示中只有一个图层，因此图层标记为“1”。每个 Graph 窗口都至少有一个图层，单击图层标记可在不同的图层之间切换，也可直接用鼠标选择不同曲线直接选择图层。通过 View → show → active layer indicator 命令，即可将当前图层高亮显示出来，这在编辑多个图层时显得十分方便。通常页面（Page）属性是不修改的，但是图层的属性就很有必要进行设置，通过修改图层的属性，可以呈现更复杂的图形。

（4）Frame（框架）。

通过 View → show → Frame 命令可以显示/隐藏图层框架。

（5）Plot（图形）。

在 Layer 上面，可以进行绘图操作，包括添加曲线、数据点、文本，以及其他图形。Plot（绘图）与 Graph（图形）有些差别，事实上 Plot 也有图形的意思。为了方便，前者可以理解为“动态”即作图，后者理解为“静态”即图形。

3.1.2 作图操作

以 C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Graphing\Group.DAT 为例。首先通过 File → Import 命令导入该文件数据，如图 3.2 所示。

在确定列属性（X、Y、Z 属性）之后，直接选中需要操作的列，执行相应的二维图形图标或 Plot 命令即可，如 Plot → Line+Symbol → Line+Symbol，绘制结果如图 3.3 所示。



	A(X)	B(Y)	C(Y)	D(Y)
Long Name				
Units				
Comments				
1	1	1	2	3
2	2	2	4	6
3	3	3	6	9
4	4	4	8	12
5	5	5	10	15
6	6	6	12	18

图 3.2 为作图准备数据

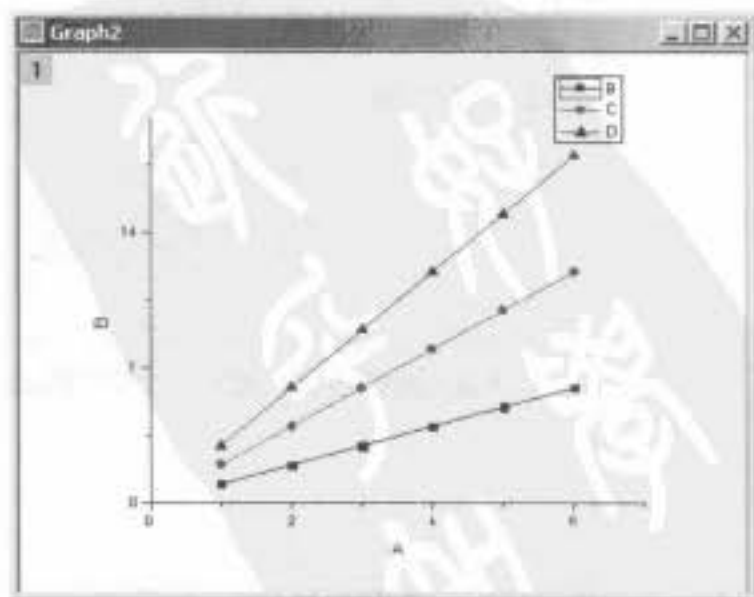


图 3.3 绘制结果图形

可见，作图的步骤是首先选择数据，通过鼠标拖动，或使用组合键：Ctrl 键单独选取、Shift 键选中区域，通常是以列为单位选取（也可以只选取部分行的数据），列要设定自变量和

因变量，通常最少要有一个 X 列，如果有多个 Y 列则自动生成多条曲线，如果有多个 X 列则每个 Y 列对应左边最近的 X 列。其次是选择作图类型，典型的是点线图，作图时系统自动缩放坐标轴以便显示所有数据点，由于是多个曲线，系统会自动以不同图标和颜色显示，并自动根据列名生成图例（Legend）和坐标轴名称。

也可以在不选中任何数据的情况下，执行这个命令，会弹出 Plot Setup（图形设置）对话框进行详细设置，如图 3.4 所示，这是 Origin 推荐的作图方式，但操作起来没有直接选中列作图方便。

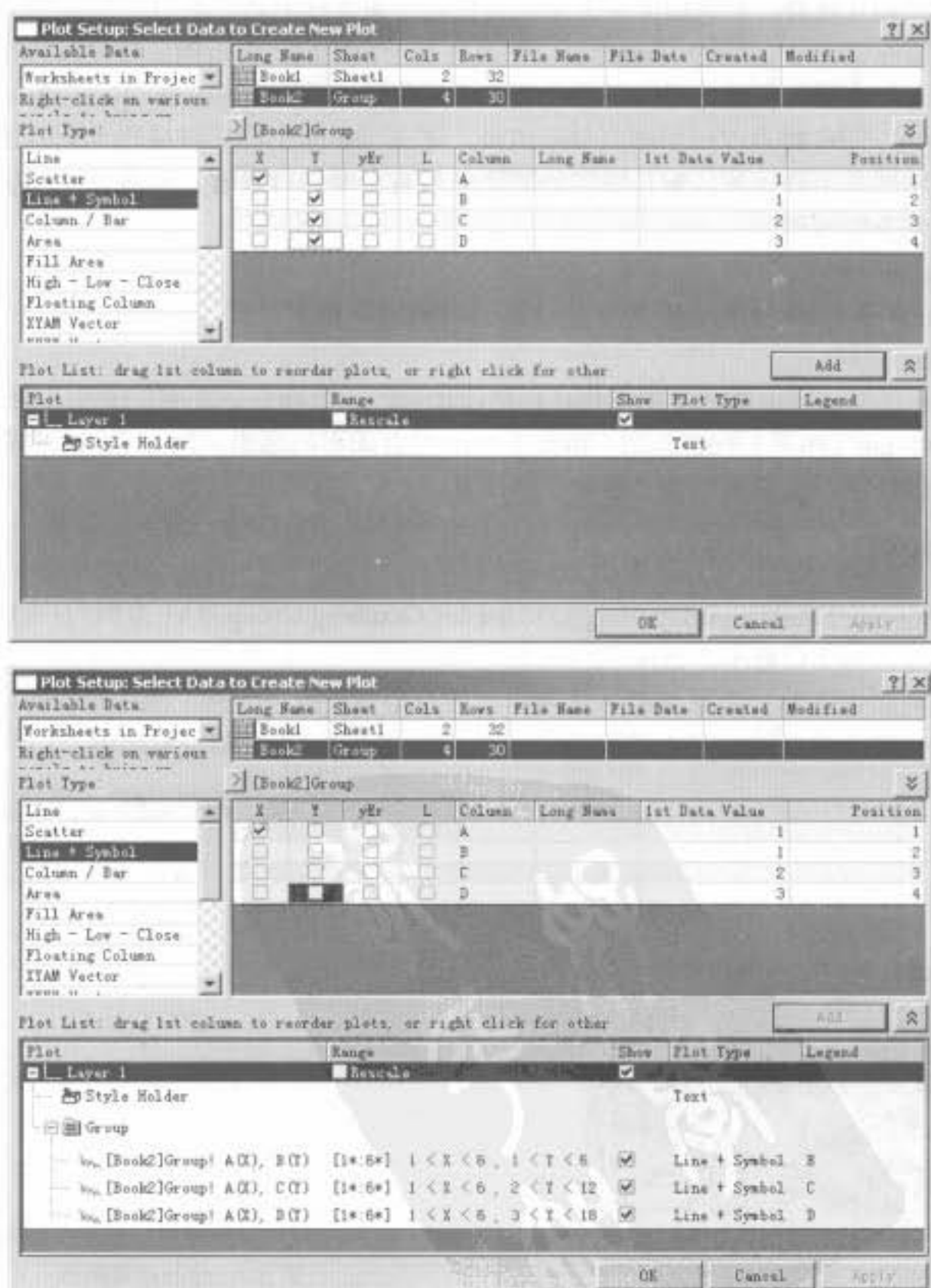


图 3.4 曲线设置对话框

在这个对话框里面，顶部可以选择数据来源，即电子表格（工作表）；中间部分，左边可

以选择 Plot Type (图形类型), 右边可以设置列属性如 X、Y、Z 属性, 而不管原来各列的属性设置; 设置好上面两部分之后, 单击 Add (添加) 按钮, 可以把图形添加到底部的列表中; 在底部列表可以进一步详细设置, 例如设置绘图的数据点范围等。


最后, 单击 OK 按钮, 即可生成图形。如果仍然设置第一列为 X, 另三列为 Y, 则作图结果如图 3.3 所示。

3.2 图形设置

科技作图, 并不是要把图形做得很美观, 而是首先要做得很“标准”。因为只有“标准”, 不同文献之间、不同实验之间才具有相互比较的意义。作图的目的是数据可视化, 数据可视化的目的是为了图形“说话”, 呈现实验结果的变化规律并相互比较, 是更加有效的“定量”描述。Origin 能做出标准的科技图形, 这就是 Origin 软件存在的最重要价值, 因此图形的设置部分是 Origin 作图中最基本也是最重要的内容。

所谓图形的设置, 是指在选定作图类型 (Type) 后, 对数据点 (Symbol)、曲线 (Line)、坐标轴 (Axe)、图例 (Legend)、图层 (Layer) 以至于图形整体 (Graph) 的设置, 最终产生一个具体地、准确地和规范的图形。

3.2.1 图形设置

双击数据曲线, 弹出 Plot Detail (作图细节) 对话框, 如图 3.5 所示, 可对图形进行相关设定, 结构上从上到下分别是: Graph (图形)、Layer (层)、Plot (图形)、Line (线)、Symbol (点)。下图当前显示的是数据曲线的内容, 单击  按钮可隐藏或显示左边窗口。

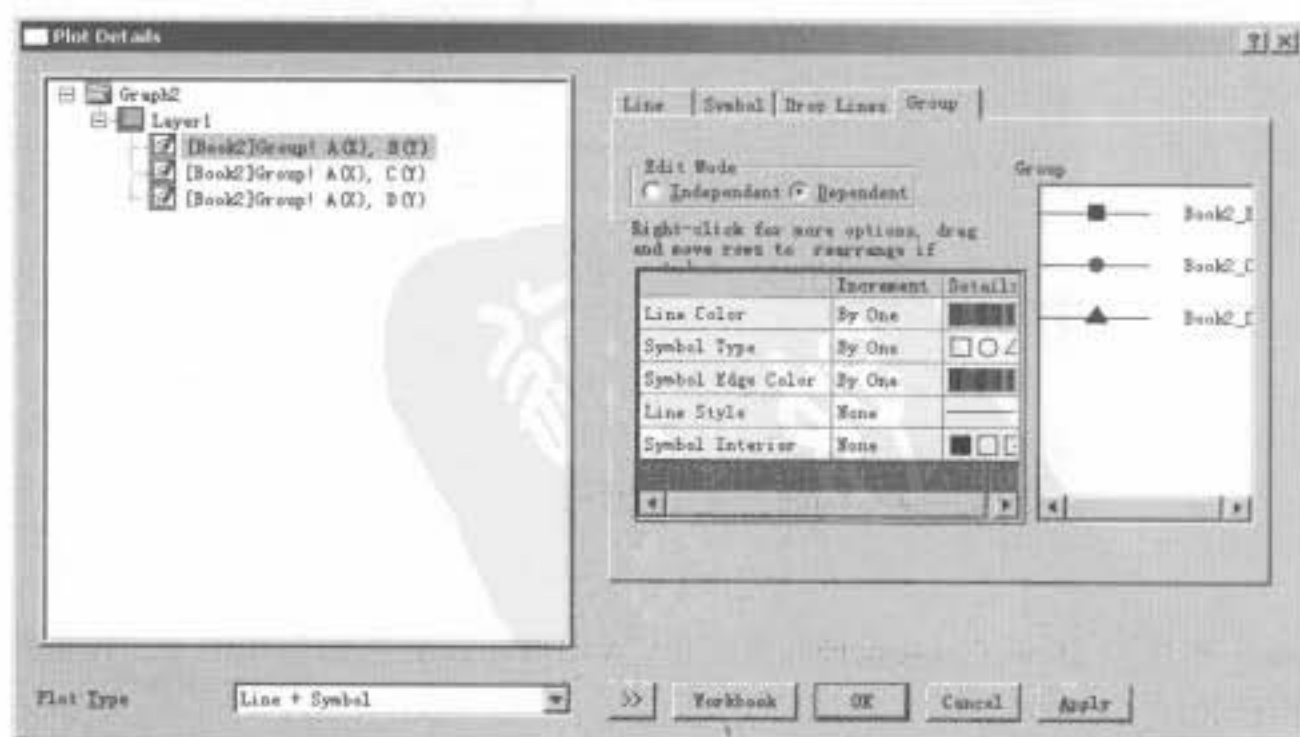


图 3.5 Plot Detail 对话框

要留意的是, 如果先选中多列数据绘制多曲线图形, 由于系统默认为组 (Group), 即所有曲线的符号 (Symbol)、线型 (Line) 和颜色 (Color) 会统一设置 (按默认的顺序递进呈现)。这对于大部分图形来说是比较合适的, 但缺点是很多参数不能够个性化地定制。如果希望定制一个组 (Group) 中各曲线的具体参数, 就要选择“Edit Mode”中的 Independent (独立)

选项。

(1) Symbol 选项卡。

本选项主要设置数据点的呈现方式，如符号、大小、颜色等。可用鼠标双击曲线上的数据点打开这个选项卡，如图 3.6 所示。

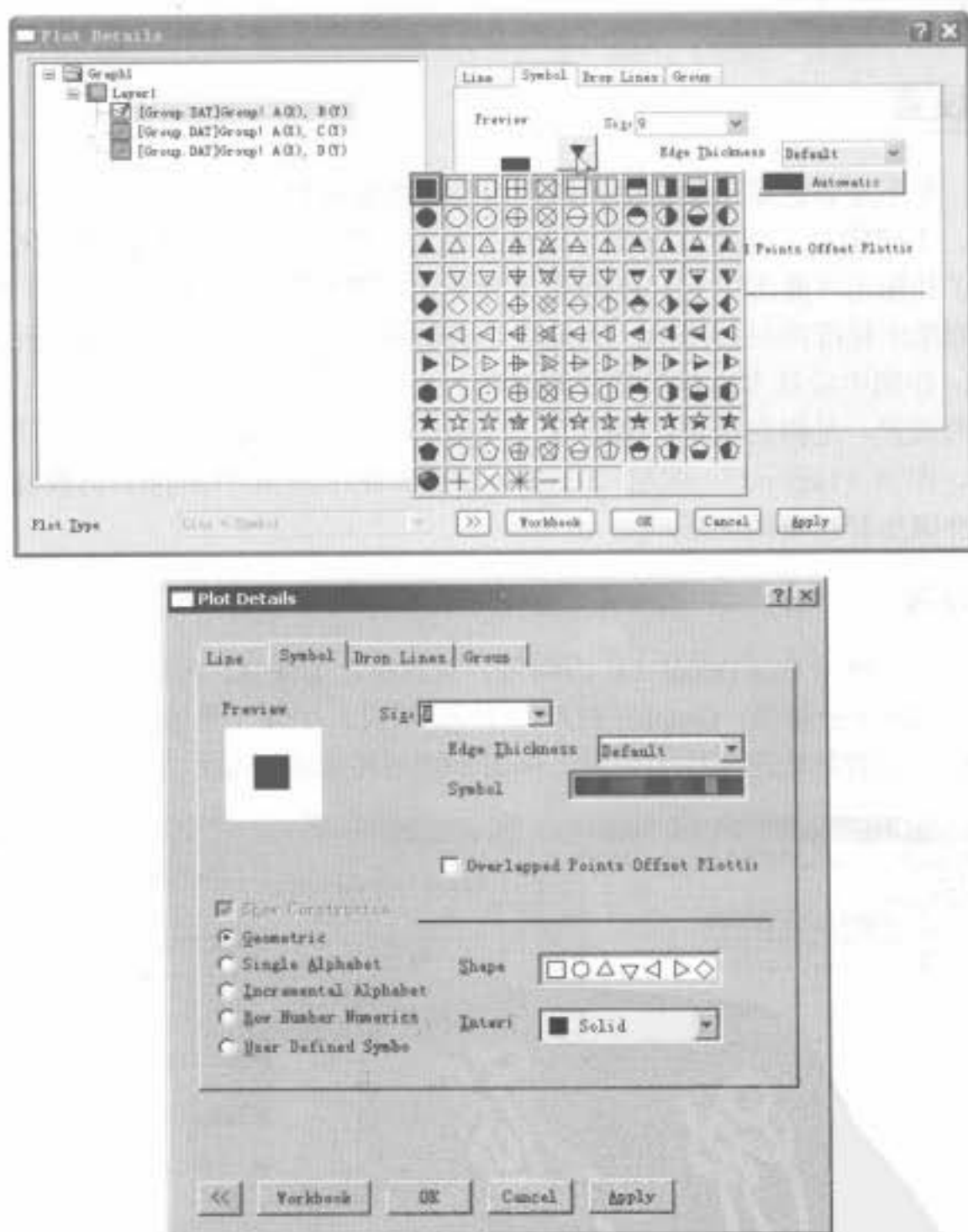


图 3.6 Symbol 选项卡

Preview: 不选中 Show Construction 复选框，单击 Preview 按钮后面的下三角按钮，打开符号库，可选择其中一种符号。

Show Construction: 自定义符号，选中此复选框，出现包括几何符号、希腊符号、递增希腊符号、行号和自定义符号等选项卡，用户可自行选用，以便组合成一个新的符号。

Size: 选择符号的大小，默认是 9 Point，根据实际需要改变大小，如果是屏幕显示，一般小于 9 都可以，如果要发表论文（因最终整体图形要缩小），可以选择到 36 Point。

Edge Thickness: 当选择的符号为空心时，该选项可设置符号的边框和半径的比例，用百分比表示。

Color: 设置符号的颜色, 包括单一颜色, 渐进色 (每个数据点用不同的颜色表示) 等。

Overlapped Point Offset Plotting: 如果在曲线中有重合的数据点, 选中此选项, 则重复的数据点在 X 方向上错位表示。

(2) Line 选项卡。

本选项主要设置曲线的链接方式、线型、线宽、填充等选项, 如图 3.7 所示。

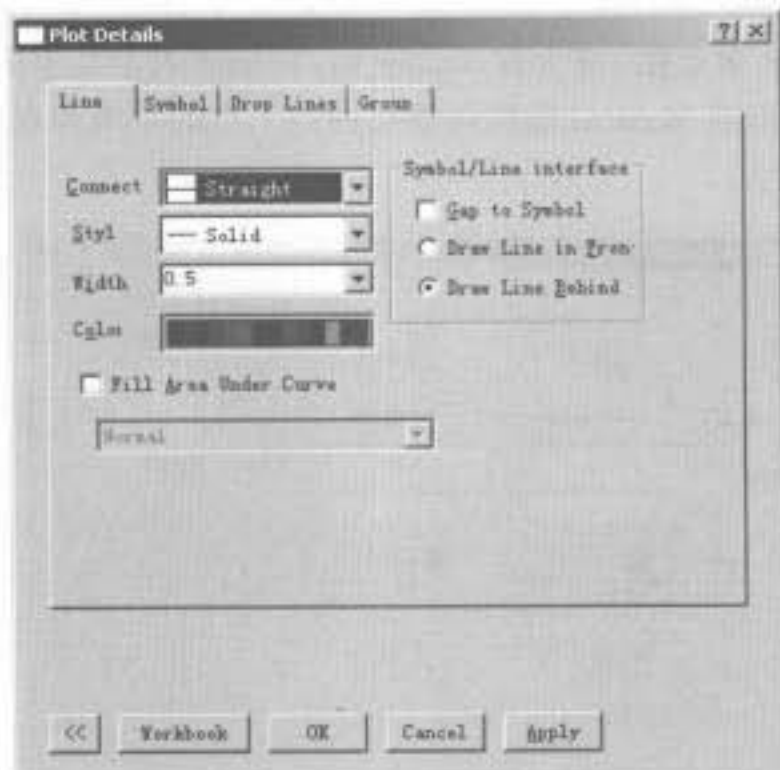


图 3.7 Line 选项卡

Connect 下拉表中为数据点的连接方式, 如直线型, 点线型, 此外还有:

B-Spline: 对于坐标点, Origin 根据立方 B-Spline 生成的光滑曲线, 和样条曲线不同的是该曲线不要求通过原始数据点, 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。

Spline: 用光滑的曲线连接所有的点。

Bezier: 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。

说明, 选择以上三种链接方式会得到平滑曲线可以使图形美观, 但具体使用何种平滑曲线的效果, 要视具体的情况, 以能够准确合理地表达图形为主, 有时候为了科学的需要, 不能使用平滑效果。结合 symbol/line interface 的设置, 可得到平滑曲线的更佳效果。

Style: 线条的类型, 如实线、虚线等。

Width: 调节线条的宽度, 如果是屏幕显示设置为 0.5 即可, 如果要发表论文, 线宽可设置为 3 加粗。

Color: 调节线条的颜色。

Symbol/Line interface: 线与点的位置关系, 对曲线显示效果有一定影响, 有三个选项。

- 1) Graph to Symbol: 显示符号和线条之间的间隙。
- 2) Draw Line in Front: 连线在符号的前面。
- 3) Draw Line Behind: 连线在符号后面。

Fill Area Under curve: 填充曲线, 有三个选项:

1) Normal: 将曲线和 X 轴之间的部分填充。

2) Inclusive broken by missing values: 根据第一和最后一点生成一条基线, 填充曲线与基线之间的部分。

3) Exclusive broken by missing values: 根据第一和最后一点生成一条基线, 填充曲线与基线之外的部分, 即跟第二种情况相反。

(3) Drop Lines 选项卡。

当曲线类型是 Scatter(散点图)或含有 Scatter 时, 即出现表示数据的点时, 选中 Drop Lines 选项卡中的 Horizontal 选框或 Vertical 选框可添加曲线上点的垂线和水平线, 能更直观地读出曲线上的点, 如图 3.8 所示。

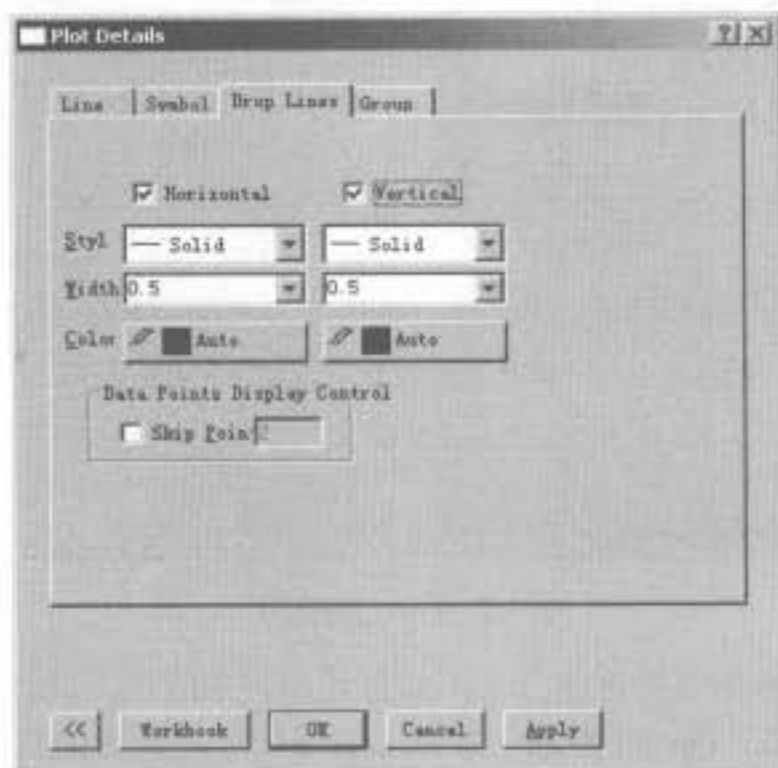


图 3.8 Drop Lines 选项卡

(4) Group 选项卡。

当 Graph 图形中有几条曲线时, 并且曲线联合成一个 Group (组) 时, Plot Details 对话框中将出现 Group 选项卡, 如图 3.9 所示。

Edit Mode: 两种编辑模式。

Independent: 表示几条曲线之间是独立的, 没有依赖关系;

Dependent: 表示几条曲线之间具有依赖关系, 并激活下面的几个选项, 曲线颜色、符号类型、曲线样式和符号填充样式, 分别单击 Details 栏, 出现一个小滑块, 单击可进入详细的设置窗口, 单击 Line Color 行的 Details 项的小滑块, 弹出对话框中列出的是各曲线的颜色, 曲线 1 为黑色, 也可以单击此行, 在下列列框中选择其他颜色。

Symbol Interior: 表示符号填充样式, 可为实心、空心、交叉等。

以上的目的是将一组曲线集中设置, 使其从符号、线型等外观上有一种渐进式的关系, 使多条曲线的关系和规律性一目了然。但当出现 Group 选项时, 每条曲线的属性不能够独立设置, 除非选中 Independent (独立) 选项。

当 Graph 图形为条状图、柱状图、饼图等时, 在 Plot Details 对话框略有不同, 如图 3.10 所示, 因为这些图形涉及内部填充的问题, 因此出现的是 Pattern (模板)。



图 3.9 Group 选项卡

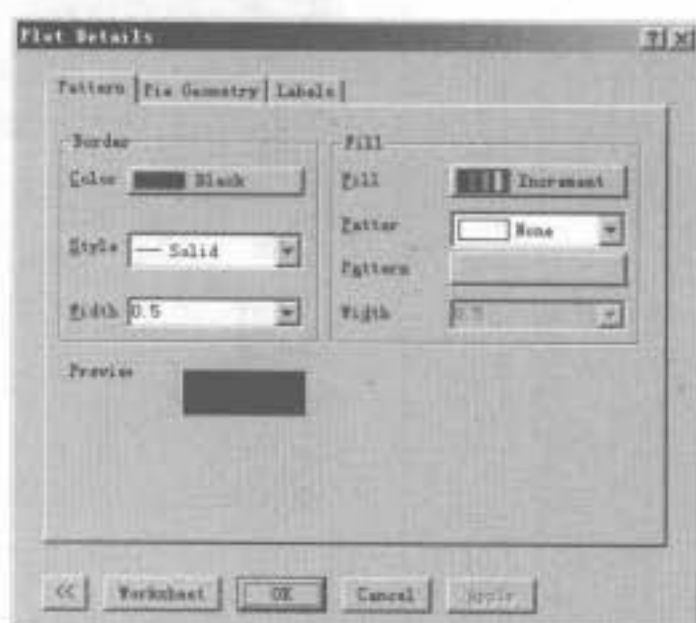


图 3.10 Plot Details 对话框

3.2.2 坐标轴设置

坐标轴的设置是所有设置中是最重要的，因为这是达到图形“规范化”和实现各种特殊需要的最核心要求。没有坐标轴的数据将毫无意义，不同坐标轴的图形将无从比较。

图形“规范化”和“格式化”之所以重要，是因为 Origin 中的图形都是所谓的科学或工程图形，这些图形都具有确定的物理意义。因此如果不规范，那么图形要表达的意义也就不明确。例如一些图形要求对数坐标才能合理地表达结果，如果做成普通的线性坐标，显然是不可能接受的。再如很多光谱图形的横坐标或纵坐标都具有较明确的范围，如果人为的放大或缩小坐标轴显然也是不合理的。

双击坐标轴弹出以下 X Axis (或 Y Axis, ZAxis) 对话框，可对坐标轴进行设置，如图 3.11 所示。

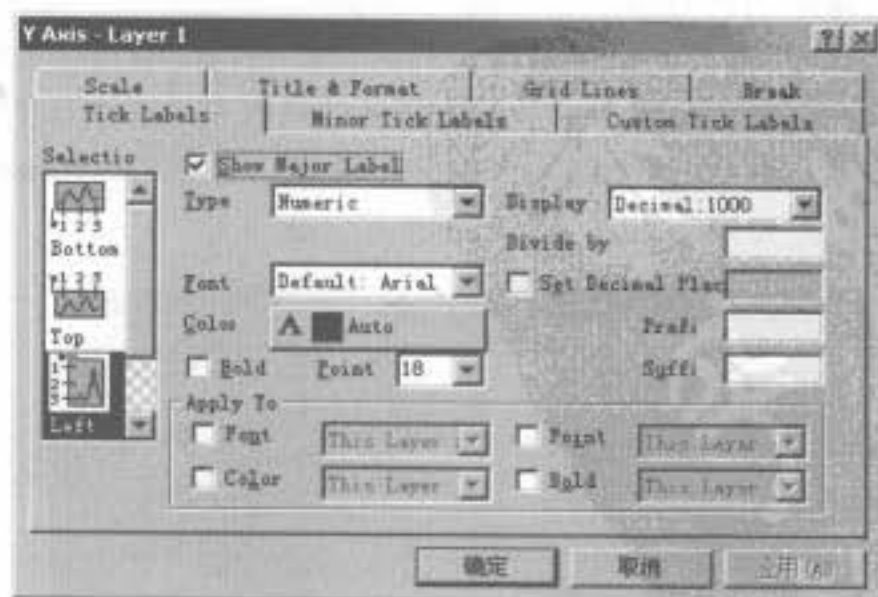


图 3.11 X Axis 对话框

(1) Tick Labels 选项卡：主要用于设置坐标刻度标签的相关属性，如图 3.12 所示。

这个选项卡设置坐标轴上数据 (Label: 标签) 的显示形式，如是否显示、显示类型、颜色、大小、小数点位置、有效数字等。

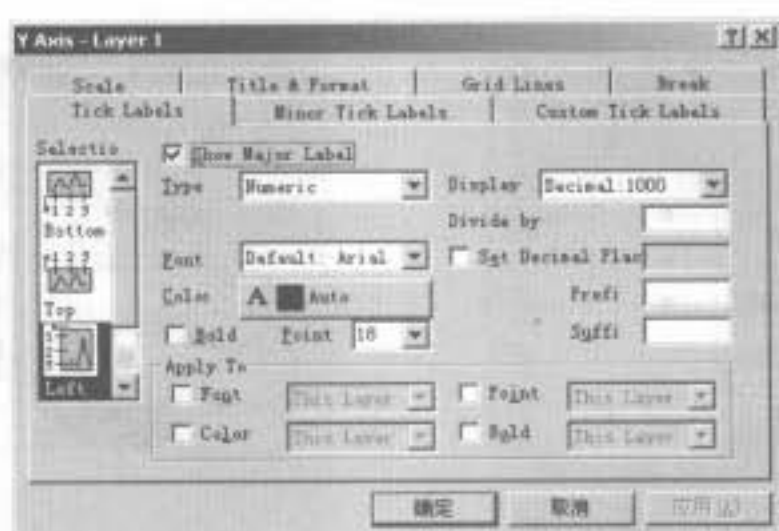


图 3.12 Tick Labels 选项卡

Selection: 选择坐标轴，有四个坐标轴，分别是 Bottom（底部 X 轴坐标）、Top（顶部 X 轴坐标）、Left（左边 Y 轴坐标）和 Right（右边 Y 轴坐标），图形默认的有 Bottom 和 Left 两个坐标。

Type: 数据类型，默认状态下与源数据保持一致，本例中为数值型，也可以修改显示格式，例如强制显示为日期型等。如果源数据为日期型，坐标轴也要设置成日期型才能正确显示。

Display: 主要用于呈现数据的格式，如十进制、科学记数法等。

Divide by: 整体数值除于一个数值，典型的为 1000，即除以 1000 倍，或者 0.001，即乘以 1000 倍，这个选项对于长度单位来说是有用的。

Set Decimal Places: 选中复选框后，填入的数字为坐标轴标签（数值）的小数位数。

Prefix/Suffix: 标签的前缀/后缀，如在刻度后加入单位 mm、eV 等。

Font: 字体格式、颜色、大小等。不同的字形将影响到数值的形状，选择的依据是最终显示时能看得清楚，如果要发表论文，字的大小请选择 36，即将字体加到特别大。原因是论文的图形通常要缩小到 5cm 左右，缩小之后，曲线图形的规律趋势还是比较清楚的，但是所有数值文字因太小变得不清楚，因此要用比较夸张的大小。

Apply to: 上述设置应用的范围，如本例中应用于当前层。

以上是对 Left（即 Y 轴）的坐标刻度进行设置，也可以通过切换对顶部（Top）、底部（Bottom）的坐标刻度分别进行设置。由于系统默认的只有左边和底部的坐标轴，因此如果需要右边和顶部的坐标轴，可以在这个选项卡中进行设置，勾选 Show Major Label 即可。

（2）Scale 选项卡：主要用于设置坐标轴刻度，如图 3.13 所示。

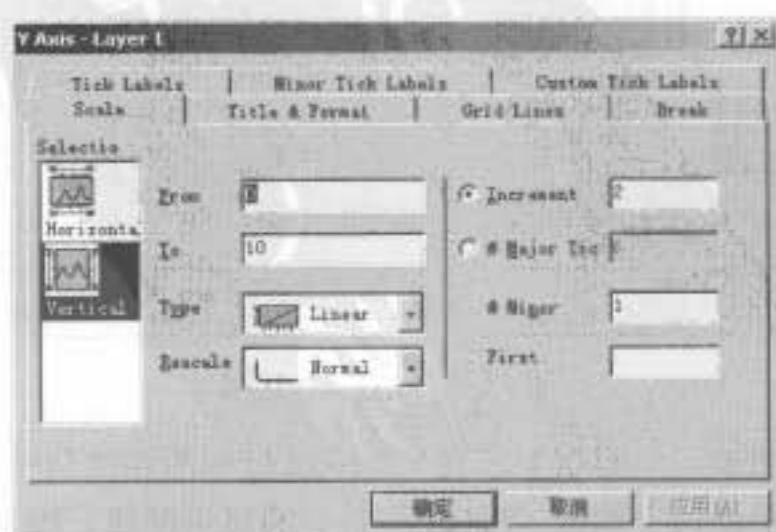


图 3.13 Scale 选项卡

Selections: 有 Horizontal (横轴) 和 Vertical (纵轴), 在三维图形中还会出现 ZAxes 选项, 默认状态下, Horizontal 为 X 轴, Vertical 为 Y 轴。

From、to: 在文本框中分别键入坐标轴的起、始点。默认情况下, 这两个值是软件根据最佳显示效果 (最小值到最大值, 再在两边预留一些空间) 自动设定的, 因此如果根据实际情况需要, 可以手工指定。

Type: 坐标轴的类型, 一共有 9 种: 常用的有如下几种:

- 1) Linear 为标准线形刻度;
- 2) log10、log2、ln, 分别以 10、2、自然对数为底的对数坐标, 该方式有利于显示不同数量级之间的数据;
- 3) Reciprocal 为倒易刻度, 即 $X'=1/X$;
- 4) Offset Reciprocal 为补偿倒数刻度, 特别是在研究温度特性时候非常有用, 如 $X'=1/X+273.14$, 其中 273.14 为 0℃ 的热力学温度。
- 5) Rescale: 坐标的刻度缩放规则;
- 6) Normal, 普通情况, 表示使用刷新方法时重新标定坐标刻度;
- 7) Auto 与 Normal 选项相同, 可以自动重新标定坐标轴刻度;
- 8) Manual, 手工定义, 不进行自动缩放。如果用放大工具改变了坐标刻度, 不重新标定坐标刻度;
- 9) Fixed From/ Fixed To, 指的是固定坐标轴的起始点或终止点, 如果要改变的话, 必须通过在 From/To 文本框中进行设定或提示是否自动设定。

以上设置主要当图形需要刷新 (单击 Graph 菜单下的 Rescale to Show All 命令) 时系统如何调整图形坐标的问题。软件自动设定虽然有时很方便, 但也有很多时候不能满足我们对图形的具体要求。

Increment: 输入坐标的步长值, 如输入 5, 表示主要坐标刻度为 0、5、10、15……。

Major Ticks: 输入要显示的坐标刻度数量, 如输入 9, 则显示 9 个主要坐标刻度: 0、5、10、15……40。

Minor: 输入主要刻度之间要显示的次要坐标刻度, 如输入 1, 表示两个主要坐标间显示 1 个次要坐标刻度, 如果输入 4 则相当于每个主要坐标分成 5 分次要坐标, 如输入 9 则分成 10 个次要坐标, 依次类推。

First: 在大部分的 Graph 图形中并没有用, 是针对日期刻度的, 指定起始刻度的位置。

(3) Title & Format 选项卡。

这里的 Title 指的是坐标轴标题 (即名称), Format 格式指的是坐标轴上刻度短线的方向和大小, 如图 3.14 所示。

Title: 在文本框中键入坐标轴标题。输入框中显示 “% (?Y)” 是系统的内部代码, 表示会自动设置使用工作表 (Worksheet) 中 Y 列的 Long

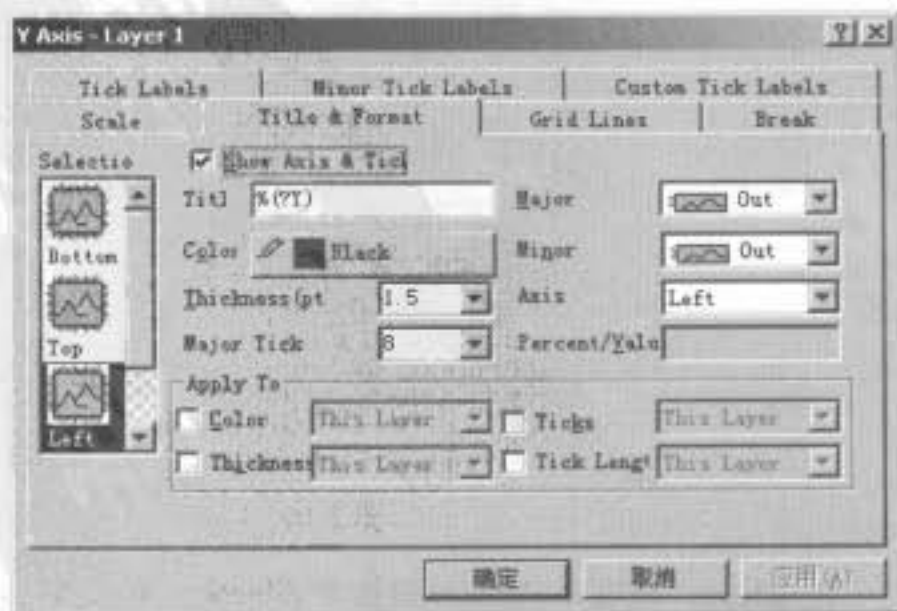


图 3.14 Title & Format 选项卡

Name 作为名称，以 Y 列的 Unit 作为坐标轴的单位。这串符号尽量不要改动，因为以后数据工作表修改了，这个图形的标题会自动跟着修改的。当然如果需要也可以直接输入标题名称。

Major/Minor 刻度显示方式：调整坐标轴中主/次刻度（短线）出现的形态，包括里、外、无、里外四种显示方式。一个典型的例子是打开（Show Axis）顶部和右边的坐标轴线，然后 Major/Minor 刻度都选择 None（无），则相当于为图形增加了顶部和右边的坐标线，即图形最后是在一个四周包围的矩形圈中的。

（4）Minor Tick Labels 选项卡，如图 3.15 所示。

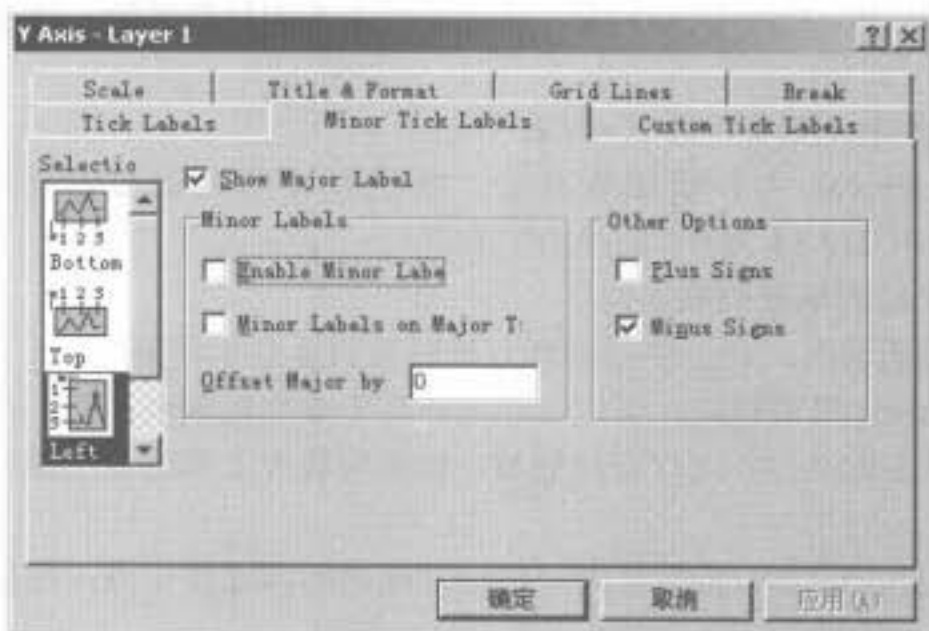


图 3.15 Minor Tick Labels 选项卡

选中 Minor Labels on Major Ticks 复选框，则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 输入框输入数字，使二者错开。

Other Options: 是否要为数值加上正或负的符号。

（5）Custom Tick Labels 选项卡，如图 3.16 所示。

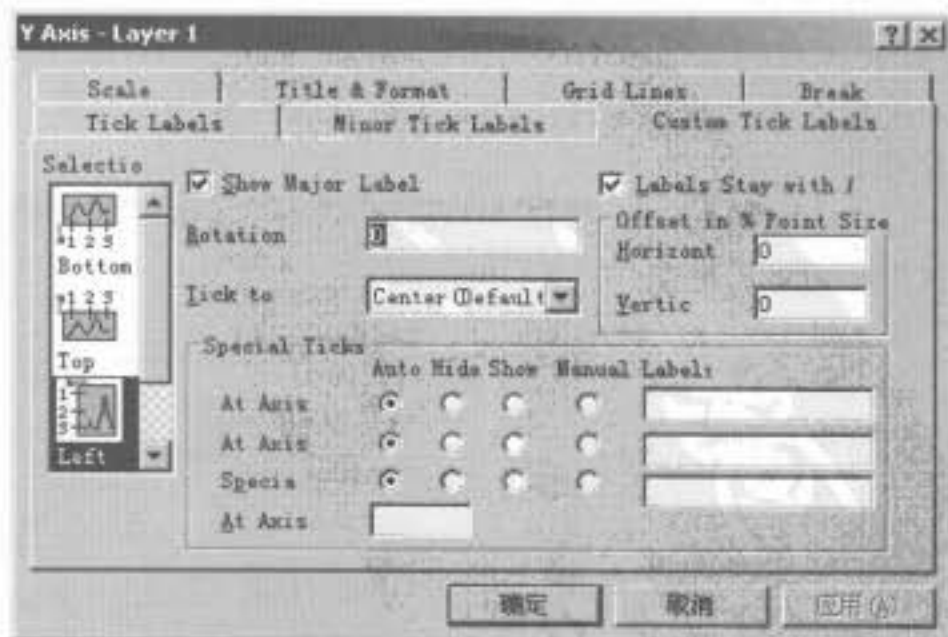


图 3.16 Custom Tick Labels 选项卡

Rotation: 在文本框填入的数字表示坐标轴标签旋转的角度，正数表示逆时针旋转，负数表示顺时针旋转。

Tick To: 标签的对齐方式:

Select Center (Default) 表示默认状态下, 标签的中间对齐坐标轴刻度;

Next to Ticks 表示标签的左边对齐刻度;

Center Between Ticks 表示标签在相邻两个刻度间。

Labels Stay with Axis: 选中此复选框, 保证刻度标签总是临近坐标轴, 否则标签在默认位置, 不随坐标的移动而移动。

Offset in % Point Size: 填入数字, 控制刻度标签(值)和坐标轴的位置关系, 偏移量。

Special Ticks: 控制是否显示标签:

Auto 表示使用默认的标签显示设置;

Hide 表示隐藏指定的标签;

Show 表示在没有显示的情况下, 显示指定的标签;

Manual 表示显示文本框中的坐标值。

(6) Break 选项卡, 如图 3.17 所示。

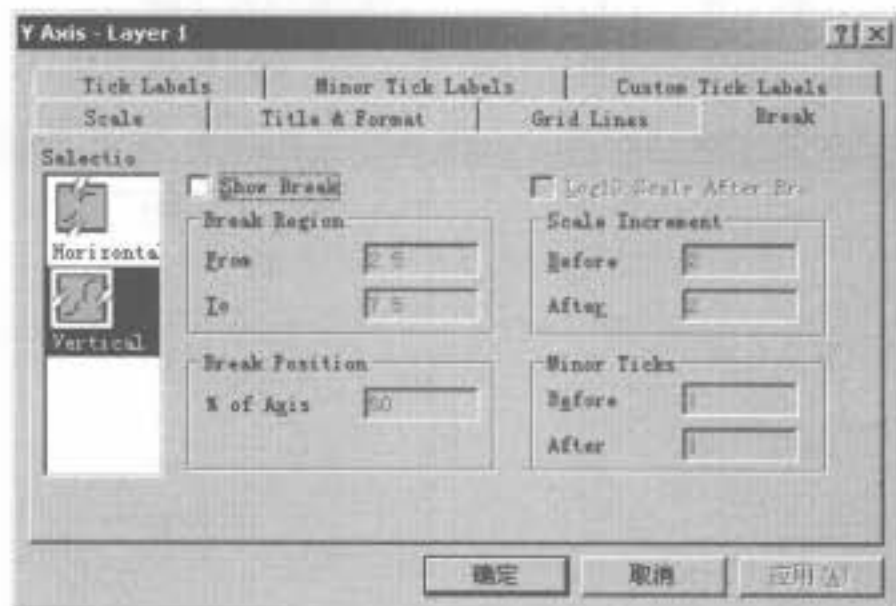


图 3.17 Break 选项卡

当数据之间的跨度较大时(中间部分没有有意义的数据点), 可用带有断点的 Graph 表示, 即通过坐标轴放弃一段数据范围来实现, 具体参数可在 Break 选项卡中设定。

Show Break: 在坐标轴上显示断点, 并激活此选项卡上的其他选项。

Break Region: 坐标轴上的断点的起始点和结束点。

Break Position: 文本框中的数字表示断点在坐标轴上的位置。

Log10 Scale After Break: 表示断点后面的坐标为对数坐标。

Scale Increment: 断点前后坐标刻度的递增步长值。

Minor Ticks: 断点前后主刻度之间的次刻度的数目。

(7) Grid Lines 选项卡, 如图 3.18 所示。

本选项卡相当于为曲线图形绘图区域绘制网络线, 可使数据点更加直观提高可读性。

Major Grids: 显示主格线, 即通过主刻度平行于另一坐标轴的直线, 下面的下拉表中可分别设定线的颜色、类型和宽度。

Minor Grids: 显示次格线, 即通过次刻度平行于另一坐标轴的直线。

Additional Lines: 在选中轴的对面显示直线, 选中 Y=0 复选框, 即在 X 轴对面显示直线。

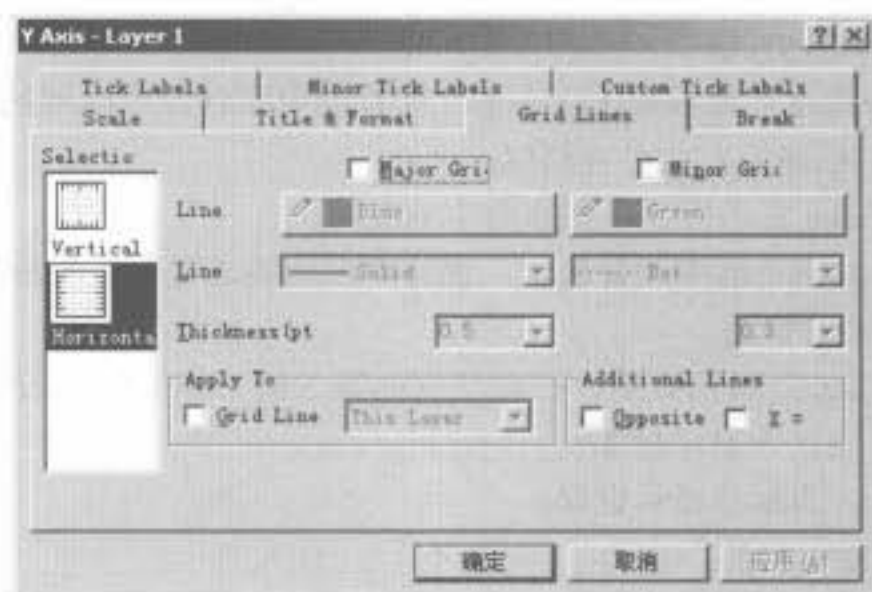


图 3.18 Grid Lines 选项卡

可以调整网格性的线型和颜色，例如使用点线和灰色等浅颜色，以便做以既显示了网格线，以能保持原有曲线图处于重要的位置不至于被网格线所干扰。

另外也可以按住鼠标左键移动调整坐标轴的位置以实现特殊的坐标，如图 3.19 所示。

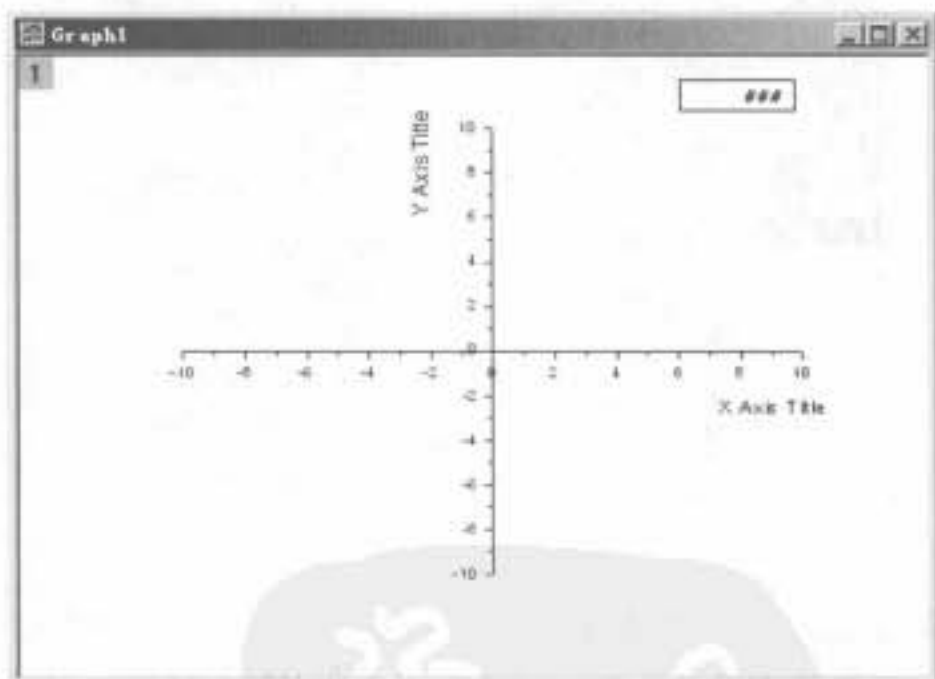


图 3.19 移动调整坐标轴的位置

3.3 图例和文本

3.3.1 图例设置

图例 (Legend) 的主要目的是当一个图形中有多条曲线时，使用不同的图标、线型和颜色来呈现不同的曲线，以便增加可读性，并增加简单的文字注释，如图 3.20 所示。

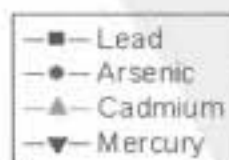


图 3.20 典型的图例

要对图例进行设置,只要选中图例,然后通过 Format → Object Properties 命令打开 Object Properties (对象属性)对话框即可,如图 3.21 所示。如果不小心删除了图例,可以单击工具栏上的 New Legend 按钮重新建立。

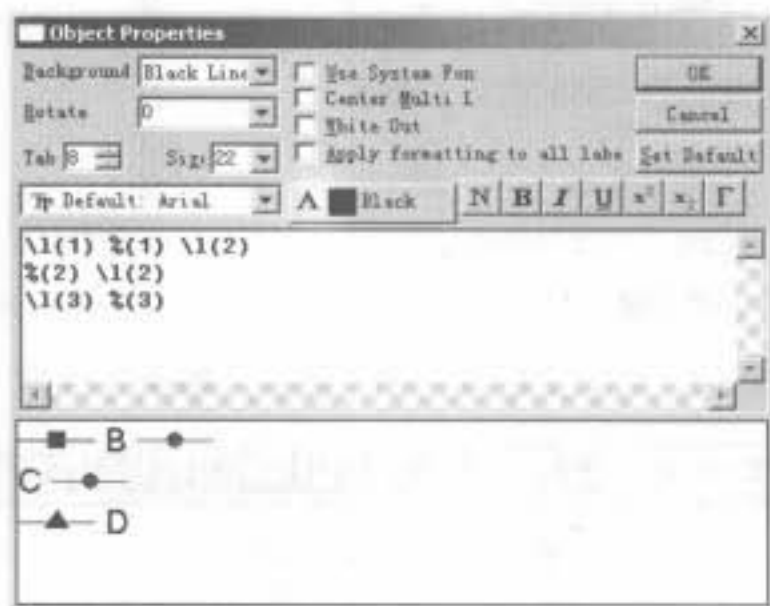


图 3.21 图例的设置 (Symbol, Line, Color and Text)


对象属性对话框中“\1(1)”和“%1(1)”对应着第 1 条曲线的线型和符号,以此类推。另外,如果用到特殊的格式,包括上下标、希腊字母等,系统会自动增加一些标记 (Mark),这些标记是不能删除的,最终的效果以对话框下面的预览 (Preview) 效果为准。

主要的设置:

- 1) Background: 图例 (区域) 的背景,例如是否有边线,是否阴影等。
- 2) Rotate: 旋转角度。
- 3) Use System Font: 是否使用系统字体。
- 4) Center Multi Labels: 是否居中。
- 5) White Out: 设置白边。即使图例非透明显示。
- 6) Apply formatting to all labels: 设置样式到所有图例中。

关于字体的说明,首先字体的使用是以最终图像看得清楚为主要目的。其次如果是为了发表论文,建议使用 36Point 的大小。再次如果使用了特殊字体,典型的如温度的符号℃等,这些特殊符号在 Origin 上的显示是正常的,但输出到 Word 中将会出现乱码,最简单的解决方案是,为这些特殊符号选择“中文字体”,如宋体。特殊符号的问题也可使用 origin 的内部符号库解决。

3.3.2 添加文本

文本可以是图形的说明,主要包括坐标轴标题和图形标题,也可以是图形中其他的说明文字。单击 Text Tool 按钮 ,然后在 Graph 单击鼠标即可进行文本编辑,如果要输入其他的符号,右击选择 Symbol Map 命令即可打开相应对话框。对于常用的符号也可以编辑快捷方式:选中符号后右击,在快捷菜单中选择 Assign Shortcut 命令,打开 Assign Shortcut 对话框,选中的符号已经出现在字符串文本框中,从 Key 下拉表中选择快捷键,单击 Add 按钮,该符号就出现在下面的窗口列表中,输入文本时按下此快捷键即可得到相应的符号,如图 3.22 和图 3.23 所示。

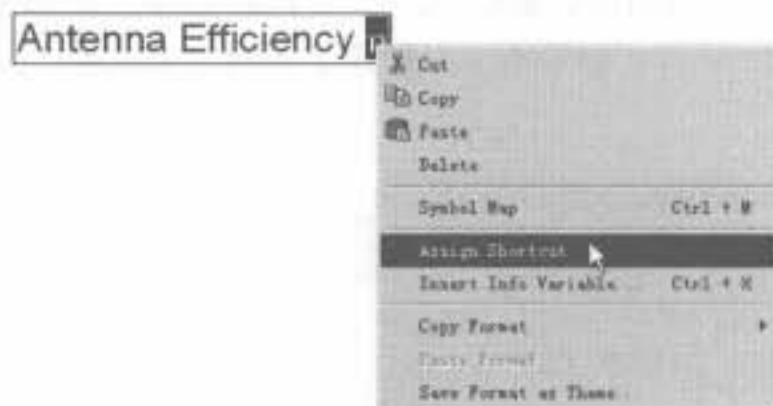


图 3.22 文本的右键菜单



图 3.23 Assign Shortcut 对话框

并将 Format 工具栏激活，对文字格式作相关调整，如图 3.24 所示。

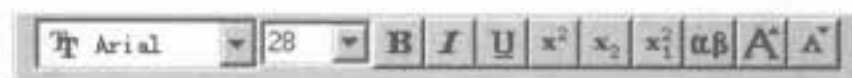


图 3.24 Format 工具栏

也可按住 Ctrl 键后双击文本，在 Text Control 对话框中对文本进行格式调整，如图 3.25 所示。

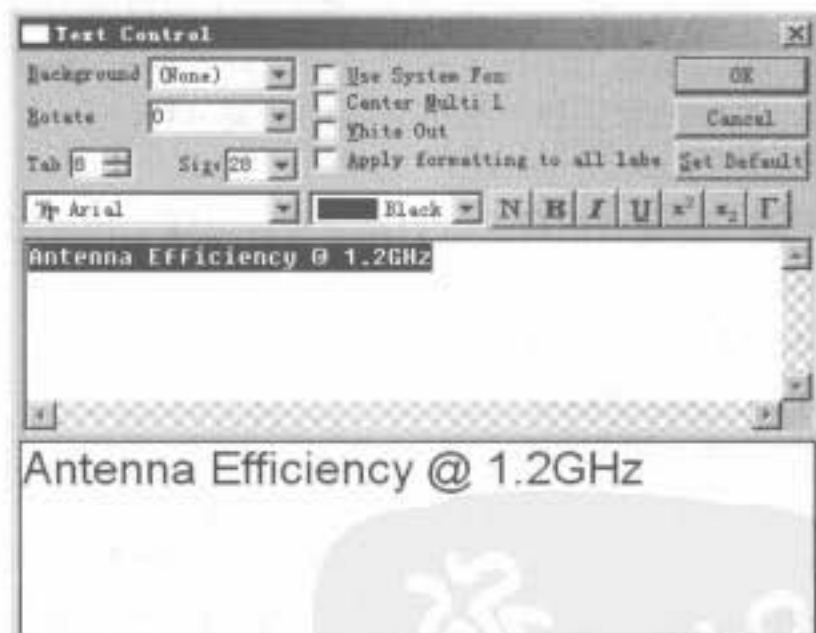


图 3.25 Text Control 对话框

此外，Style 工具栏中提供了一些有用的工具，也可以很方便地对图形和曲线的一些参数进行设置，如图 3.26 所示。



图 3.26 Style 工具栏

3.4 多曲线图形

多曲线图形指的是在同一个坐标体系中同时绘制多条曲线（这与下一章要介绍的多层图形是不同的，后者是绘制在不同坐标体系之中的）。

要绘制多条曲线，意味着有多个 Y 轴数据和至少有一个 X 轴数据。此外，这些 X 轴或 Y 轴的数据刻度范围不能相差太远，否则绘制在同一坐标系统下会出现变形的情况，达不到预想的效果（如果 X 轴和 Y 轴的数据刻度相差很大，要用下一章的多层图形进行绘制）。

绘制多曲线图形有三种方式，一种是选中多个 Y 列数据（X 列数据可以不选，软件会自动识别）然后选择一种数据类型进行绘制。第二种是使用 Plot Setup（图形设置）对话框，定义多个 Y 列。通过上面两种方法，可以快速绘制多曲线图形，并且多曲线自动定义为组（Group）。

第三种方法是使用 Layer Contents（层内容管理）对话框进行管理，方法是用鼠标右键单击层标签出现快捷菜单，然后选择 Layer Contents，如图 3.27 所示。

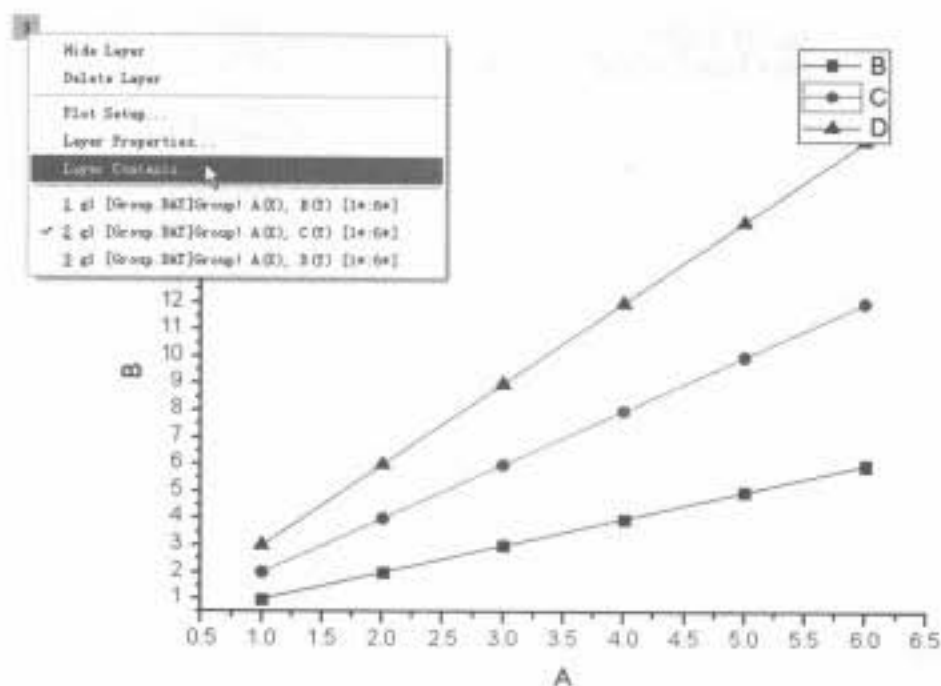


图 3.27 调用层内容管理

使用这个方法，可以在操作的任何时候动态地改变层上的曲线（数据），因此在三种作多曲线图形的方法中最重要。

如图 3.28 所示。对话框分成三个部分，最左边是 Available Data 即所有可用的数据，特指 Y 列，因为 X 列是无需要指定的，Y 列会自动找到它左边最接近的 X 列。因此从上图我们可以看到三个 Y 列，即 B、C 和 D 列，前面的 Book1 指工作簿名称，因此在这里可以浏览工程（Project）中的所有可用数据。左下角的 Sort 表示数据是否按名称排序，Show Current Folder Only 表示是否只列出当前文件夹的数据，当数据非常多时通常使用文件夹进行组织，利用这个选项可以减少数据列之间的干扰。

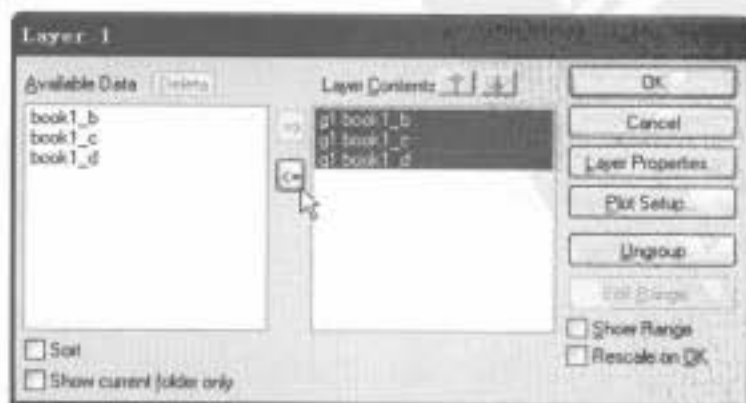


图 3.28 层内容管理

中间部分代表当前用于作图数据列，可以利用可用数据和层内容之间的向左向右按钮来动态的添加或删除数据，也可以利用 Layer Contents 旁边的向上向下按钮来调整数据列（即曲线）顺序。

最右边的是一组按钮。其中 OK 代表设定完毕并确认，Cancel 代表放弃本次设定。Layer Properties 设置层属性（下章会再介绍），Plot Setup 对曲线进行设定。Ungroup/Group 按钮用于将当前选中的多个数据列定义成组或即取消组的设置，选数据列指的是 Layer Contents 中的数据列，如果设定成 Group，则数据列前面会增加“g”表示为组。Edit Range 可以对当前数据列的作图范围（即起始值）进行设定（见图 3.29），Show Range 即显示这个范围。Rescale on OK 是否在单击 OK 按钮后将图形进行自动缩放（根据新的数据调整坐标轴范围）。

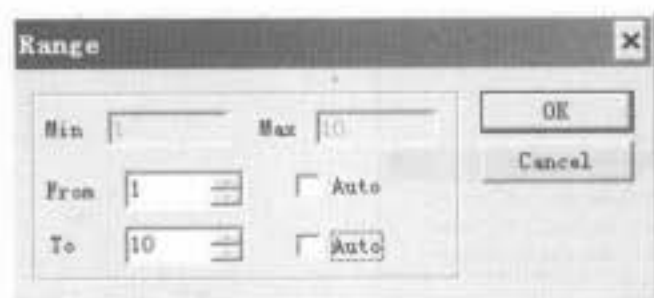


图 3.29 设置作图范围

本章要点

- 多层图形
- 图层管理
- 图形元素
- 图形工具
- 二维图形

4.1 绘制多层图形

如何在同一个绘图空间上绘制更多的曲线以构成更复杂的图形？这些图形具有不同的坐标体系或者不同的大小、不同的位置？或者一个图形是另一个图形的局部放大？方法就是使用 Layer（层）的技术，即绘制多层图形，在 Origin 中，允许绘制多达 121 个层的复杂图形。

4.1.1 多层图形实例

多层图形将图形的展示提高到一个新的层次，在 Origin 中绘制多层图形的方法很简单，下面举 3 个简单的例子。

1. 双 Y 轴图形（Double Y Axis）

绘制双 Y 轴图形的原因是有两个以上的 Y 列数据，它们共有区间接近的 X 轴坐标，但 Y 轴坐标的数值范围相差很大。如 X 轴为时间，两个 Y 轴分别为数值和百分比，如果只用一个 Y 轴绘制多曲线图形，则百分比将会被压缩成一条水平线，如果分开两个图绘制，又不能够集中表达出其中的变化意义，因此最好的选择是用两个 Y 轴，左边是数值，右边是百分比，共用一个时间作为 X 轴，如图 4.1 所示。

实例：首先通过 File→Import 导入数据文件：C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Graphing\Multiple Axes.dat。

	A(Y)	B(Y)	C(Y)	D(Y)
Long Name	Transition	Deposition	Differential	Annealing
Units				
Comments				
1	90.66407	0.01383		
2	90.72645	0.02863		
3	90.53931	0.05142		
4	90.76293	0.09162		
5	90.60169	0.00552		
6	90.60169	0.19093		
7	90.66407	0.30742		
8	89.86181		3.89812	789.38632
9	89.16699		2.91669	772.65416
10	89.37167		2.78284	767.61394
11	87.60754		2.5	770.90259
12	86.78103		2.05898	771.97493
13	85.87391		1.23881	776.58674

图 4.1 双 Y 轴图形源数据

然后选种要绘制的两个 Y 列，单击 Plot 菜单上 Multi-Curve 子菜单的 Double Y Axis 命令或相应的工具样按钮，即可生成一个的双 Y 轴图形，这实际也就是一个双层图形，每个层都可以独立管理和设置，如图 4.2 所示。

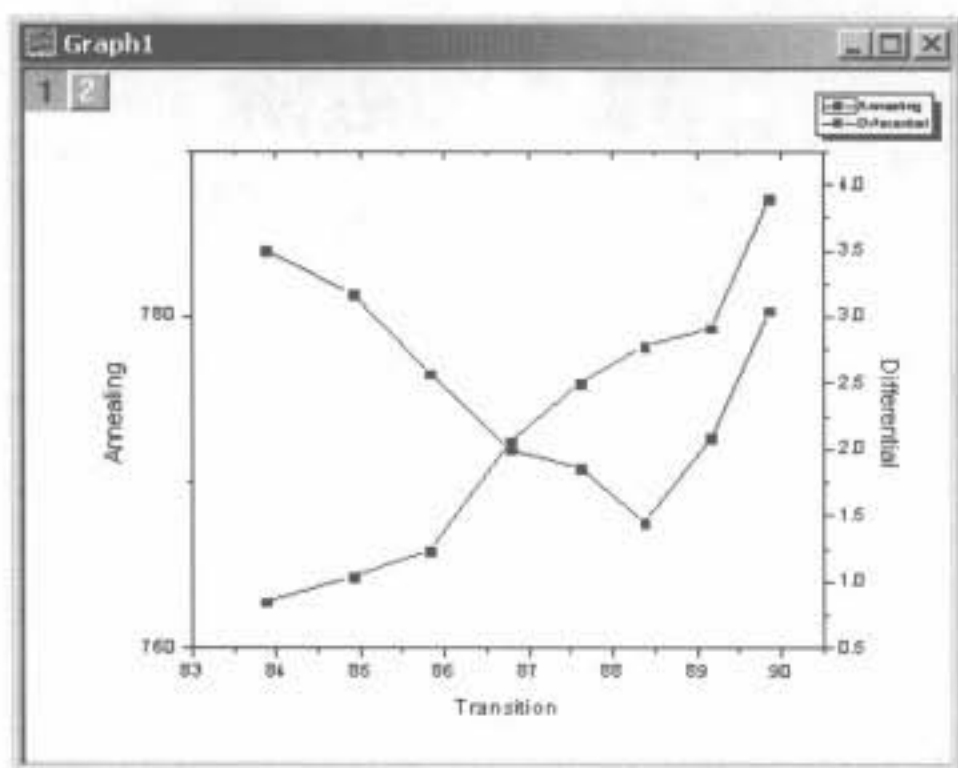


图 4.2 双 Y 轴图形

2. 局部放大图 (Zoom)

有时候在曲线变化过程中的局部区域会发生急剧的变化，而这些变化很能说明问题，因此就要做局部分放大图。

实例：使用上面的数据，选中 A 列和 D 列，然后用 Plot→Specialized→Zoom 菜单命令，即可得到以下图形。图形分成上下两部分，上图是完整的曲线，图 4.3 是局部的放大，相当于放大镜功能。通过用鼠标移动上图中的绿色区域，下图放大图形将会随之变化。这也是一个典型的双层图形。

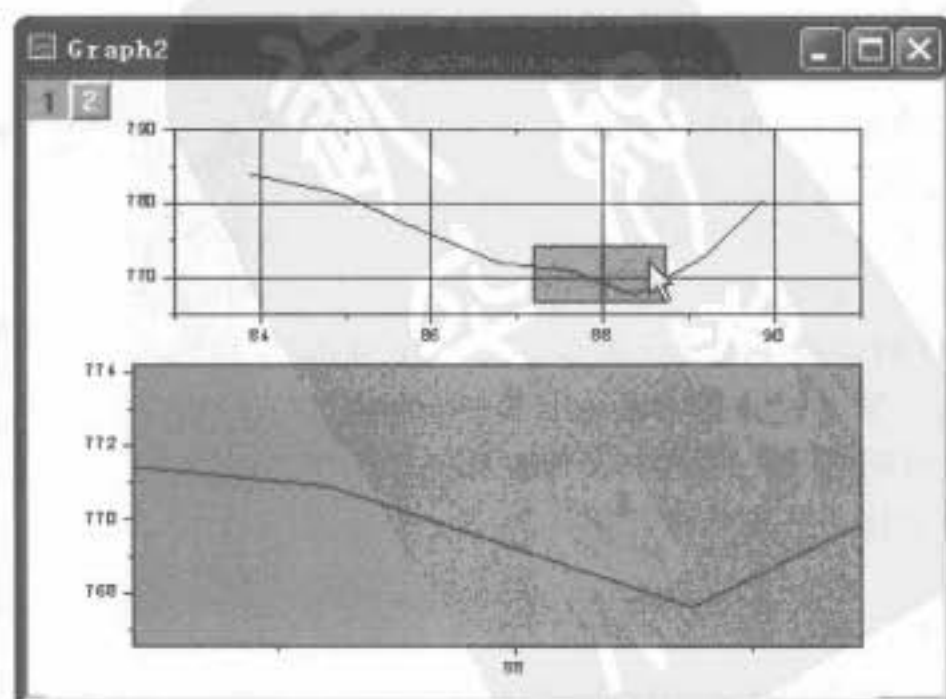


图 4.3 局部放大图形

3. 多面板图形 (Panel)

除了以上两种较特殊的双层图形外,同样可以通过 Plot 菜单或 2D Graph 扩展工具栏生成 4 Panel Graph、Horizontal 2 Panel、Vertical 2 Panel、Stack 等多层图形,如图 4.4 所示。

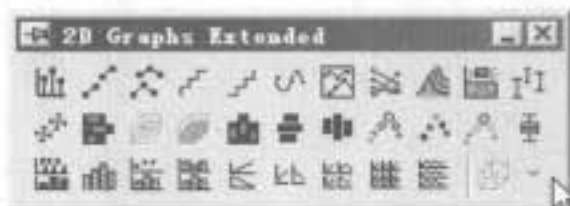


图 4.4 2D 图形扩展工具栏

下图显示的是 4 个面板的图形 (4 Panel Graph), 这是一个四层图形, 每个层都可以通过图形窗口左上角的图层图标, 通过单击鼠标右键进行管理, 方法同单层图形是一样的, 如图 4.5 所示。

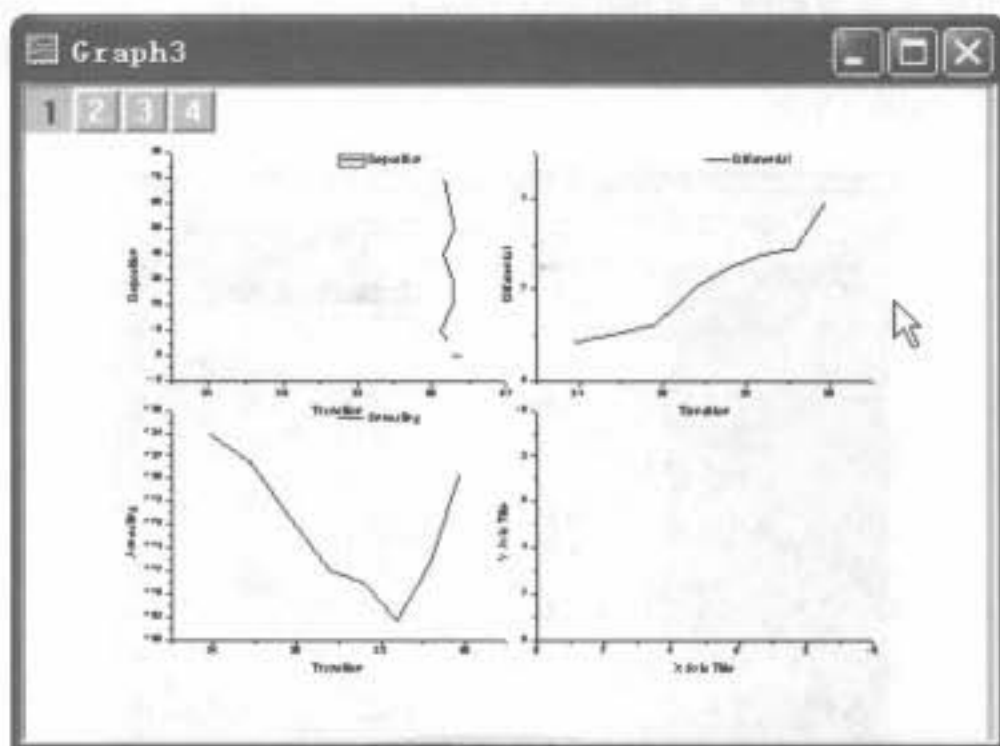


图 4.5 多面板图形

4.1.2 图层的添加

要为 Graph 窗口添加新的图层, 可以通过以下四种方式进行。

1. 通过 Layer Management (图层管理器) 添加图层

在原有的 Graph 上, 通过 Graph → Layer Management 命令打开 Layer Management 对话框。在这个对话框里面, 可以添加新的图层。

在这个对话框中可以设置与新建图层相关的信息。其中可设置的参数有:

(1) Add 标签。

Type 选项: 包括 (Normal): Bottom X + Left Y (添加默认的包含底部 X 轴和左部 Y 轴的图层)、(Linked): Top X (添加包含顶部 X 轴的图层)、(Linked): Right Y (添加包含右部 Y 轴的图层)、(Linked): Top X + Right Y (添加包含顶部 X 轴和右部 Y 轴的图层)、(Linked): Insert (在原有 Graph 上插入小幅包含底部 X 轴和左部 Y 轴的图层) 和 (Linked): Insert With Data (在原有 Graph 上插入小幅包含底部 X 轴和左部 Y 轴并包含数据的图层) 几个可选项,

如图 4.6 所示。

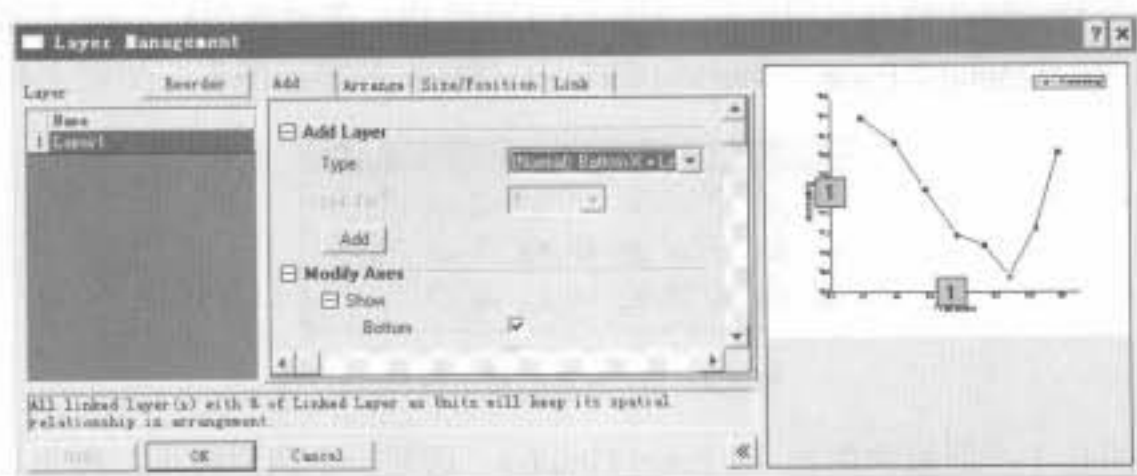


图 4.6 图层管理器

Link To 项：可以设置与新图层链接的原有图层。

以上链接（Link）的目的是保持某一图层之间的相对（坐标）关系，即以某一图层为参照物随之自动调整，如图 4.7 所示。

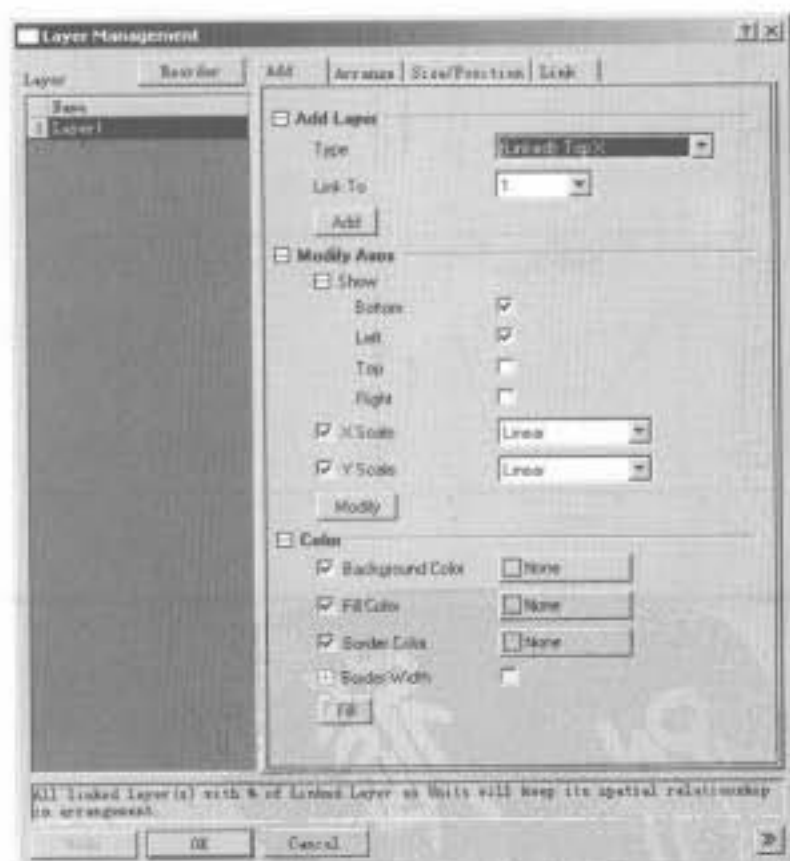


图 4.7 图层管理器-Add 标签

Add 按钮：添加图层，结果会显示在预览窗口中。

Show 复选框：要显示的数轴，包括 Bottom（下）、Left（左）、Top（上）、Right（右）四个方向。

X Scale 和 Y Scale：选择数轴刻度的表示方式。

Modify 按钮：添加数轴改变到预览中。

Background Color 项：可以设置图层背景颜色。

Fill Color 项：可以设置图层填充颜色。

Border Color 项：可以设置图层边框颜色。

Border Width 项：可以设置图层边框粗细。

Fill 按钮：添加颜色改变到预览中。

(2) Arrange 标签，如图 4.8 所示。

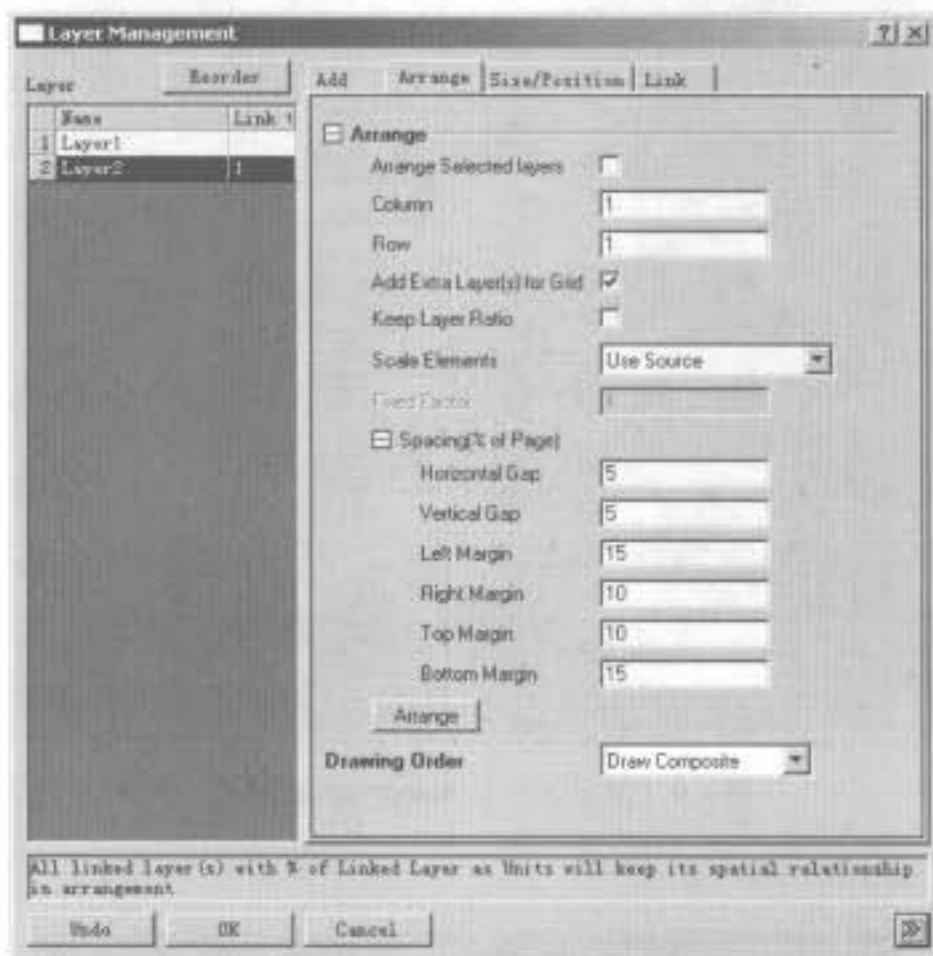


图 4.8 图层管理器-Arrange 标签

Arrange Selected Layers 选框：设置是否排列选中的图层。

Column 文本框：设置坐标图层要排列到网格的列数。

Row 文本框：设置坐标图层要排列到网格的行数。

Add Extra Layer(s) for grid 选框：是否为网格创建新的图层。

Keep Layer Ratio 选框：是否保持坐标图形的高宽比例。

Scale Element 下拉表：可以设置尺寸选项。

Fixed Factor 输入框：当 Scale Elements 下拉表选中 Fixed Factor 时，可以设置该排列网格的比例大小。

Spacing (% of Page) 项：可以设置该网格周围的空隙大小。

Arrange 按钮：添加网格排列改变到预览中。

Drawing Order 下拉表：可以设置排列对象的绘制顺序。

(3) Size/Position 标签，如图 4.9 所示。

Reference Layer 下拉表：可以设置改变尺寸操作所作用的层。

Unit 下拉表：选择尺寸单位。

Resize 项：设置尺寸大小。

Move 项：设置位置数值。

Swap 项：可以用于交换图层。

Align 项：设置对齐方式。

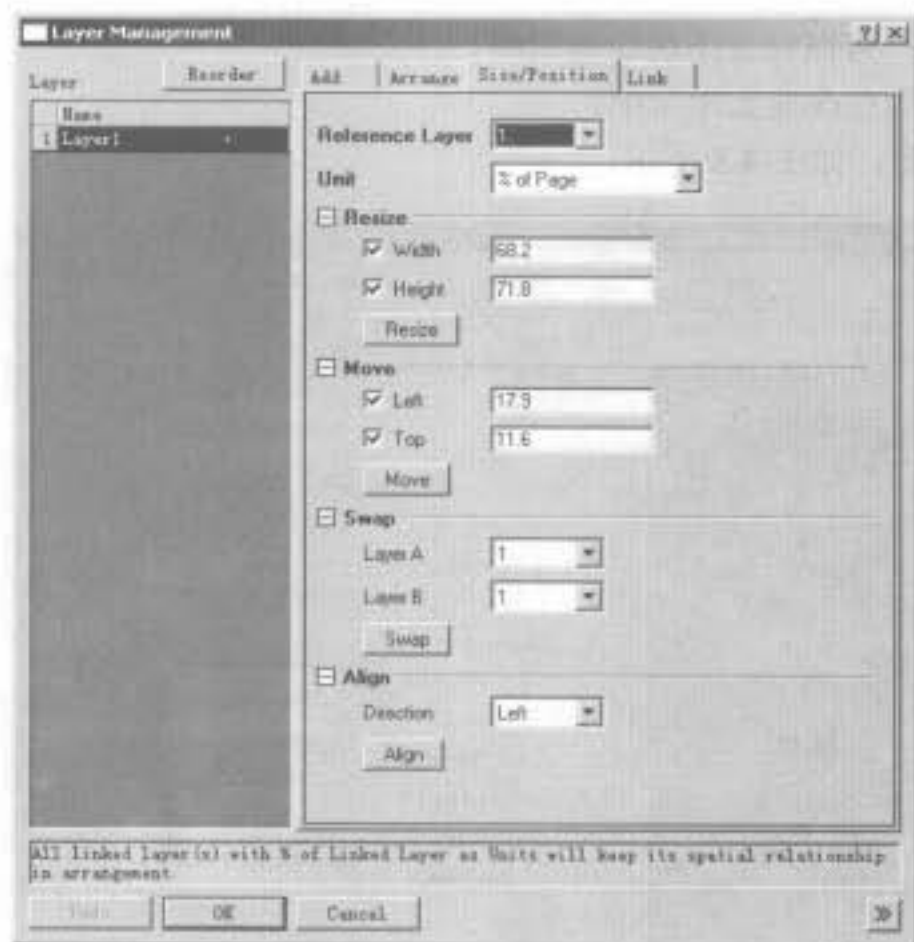


图 4.9 图层管理器-Size/Position 标签

(4) Link 标签，如图 4.10 所示。

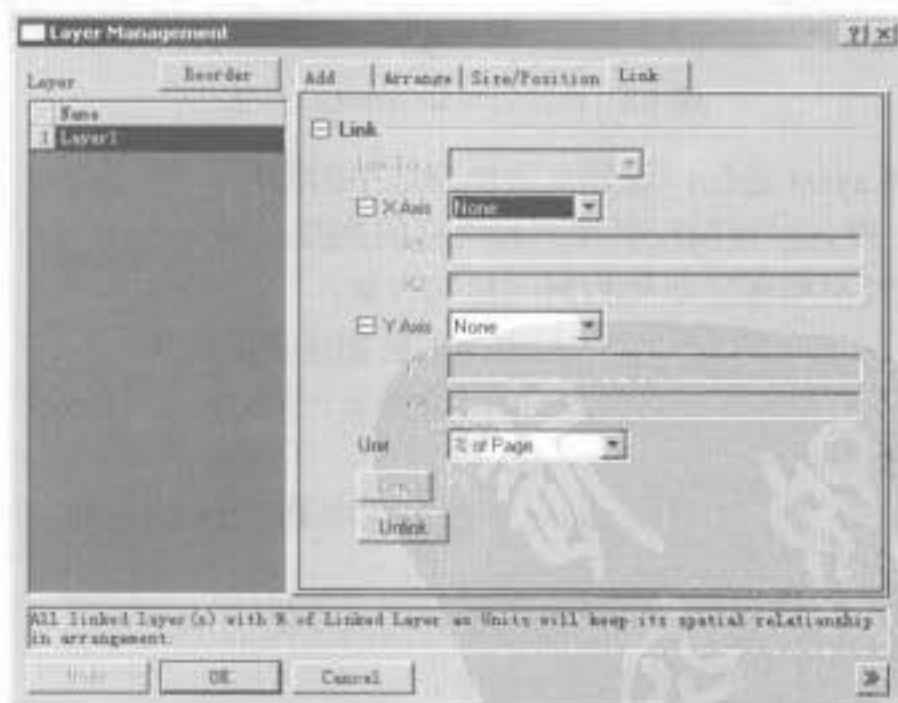


图 4.10 图层管理器-Link 标签

Link To 下拉表：可以设置当前层所连接的层。

X Axis 项：设置 X 轴的连接方式。

Y Axis 项：设置 Y 轴的连接方式。

Link 按钮：添加连接方式到预览中。

Unlink 按钮：取消连接方式到预览中。

单击 OK 按钮完成图层添加，要往图层里面添加数据，可以通过 Graph → Plot Setup 命令

或者通过 Layer Contents 添加数据（参考第3章作图操作）。

2. 通过 New Layer (Axes) 菜单添加图层

在激活 Graph 窗口的情况下，通过 Graph → New Layer (Axes) 菜单下的命令，可以直接在 Graph 中添加包含相应坐标轴的图层，如图 4.11 所示。

可以添加的图层类型包括 (Normal): Bottom X + Left Y (添加默认的包含底部 X 轴和左部 Y 轴的图层)、(Linked): Top X (添加包含顶部 X 轴的图层)、(Linked): Right Y (添加包含右部 Y 轴的图层)、(Linked): Top X + Right Y (添加包含顶部 X 轴和右部 Y 轴的图层)、(Linked): Insert (在原有 Graph 上插入小幅包含底部 X 轴和左部 Y 轴的图层) 和 (Linked): Insert With Data (在原有 Graph 上插入小幅包含底部 X 轴和左部 Y 轴并包含数据的图层)。

另外还可以通过 Graph → New Layer (Axes) → Open Dialog 命令打开 Graph Manipulation:layadd 对话框定制图层类型。除了可以使用上述基本类型以外，还可以选中 User Defined 选框进行图层定制。其中可以定制的内容包括 Layer Axes 项（坐标轴位置）、Link To 下拉表（链接图层）、X Axis 下拉表（设置 X 轴的连接方式）和 Y Axis 下拉表（设置 Y 轴的连接方式）。设置完毕之后单击 OK 按钮即可添加图层，如图 4.12 所示。

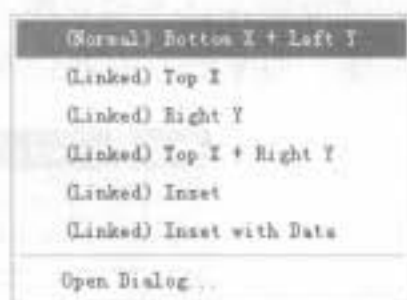


图 4.11 图层添加菜单



图 4.12 图层添加对话框

3. 通过 Graph 工具栏添加图层

在 Graph 工具栏中，也包含相应的添加图层的按钮。在 Graph 窗口选中的情况下，直接单击这些按钮即可添加图层，如图 4.13 所示。

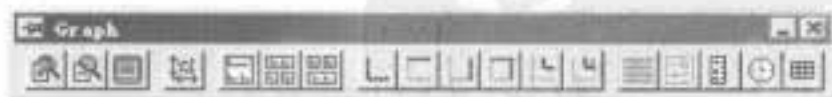


图 4.13 图形工具栏

主要按钮包括以下几个：

- (1) (Normal): Bottom X + Left Y: 添加默认的包含底部 X 轴和左部 Y 轴的图层。
- (2) (Linked): Top X: 添加包含顶部 X 轴的图层。
- (3) (Linked): Right Y: 添加包含右部 Y 轴的图层。
- (4) (Linked): Top X + Right Y: 添加包含顶部 X 轴和右部 Y 轴的图层。
- (5) (Linked): Insert: 在原有 Graph 上插入小幅包含底部 X 轴和左部 Y 轴的图层。
- (6) (Linked): Insert With Data: 在原有 Graph 上插入小幅包含底部 X 轴和左部 Y 轴并包含数据的图层。

4. 通过 Graph: Merge Graph Windows 对话框创建多层图形

在这个对话框中，可以将多个 Graph 合并为一个多层图形，这种方式对于做复杂图形是

非常方便的。在选中 Graph 的情况下,通过 Graph → Merge Graph Windows 命令可以打开 Graph Manipulation: merge_graph 对话框,如图 4.14 所示。在这个对话框的右边是一个预览图形,设置会即时反映在这个预览图上面。在左边的设置框中,可以设置的内容包括以下几种(为了显示方便,原来的左右两边图形,在书中用上下两图分开表示)。

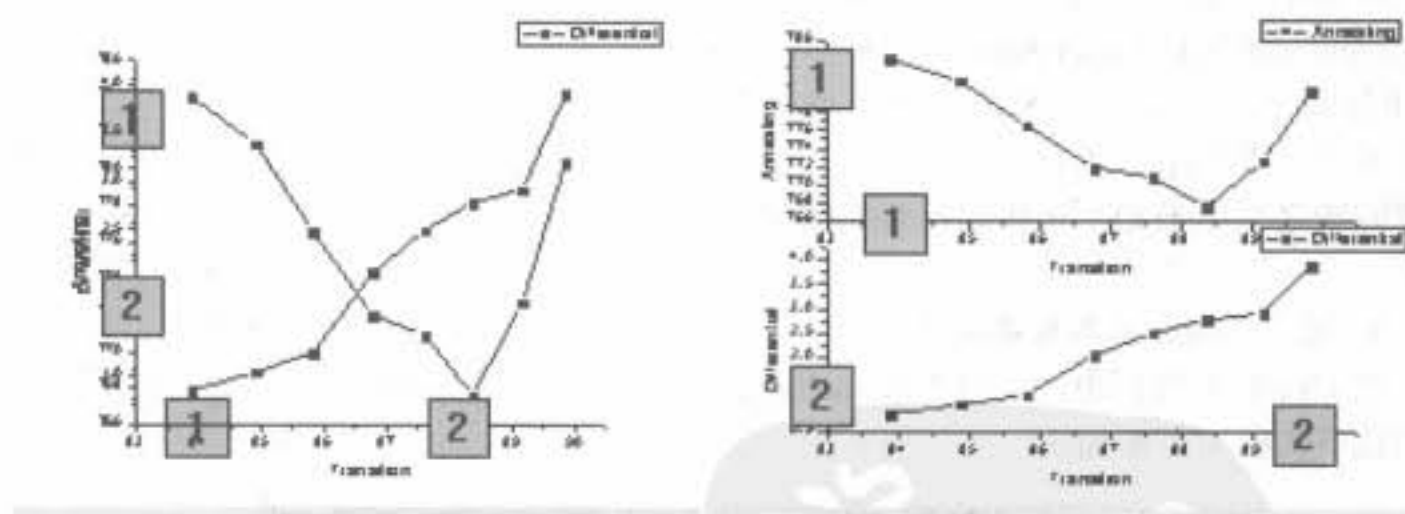
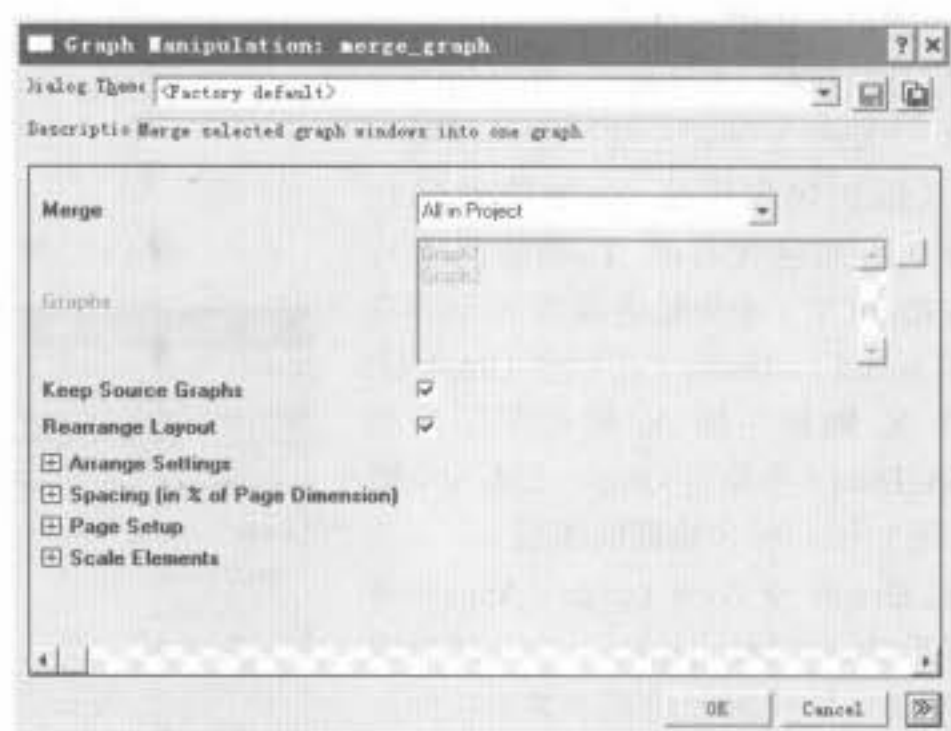


图 4.14 图形的合并设置

Merge 下拉表: 可以选择要合并的图层,包括 Active Page (活动的页面的图层)、All in Active Folder (所有活动文件夹的图层)、All in Active Folder (Recursive) (所有多次打开的活动文件夹的图层)、All in Active Folder (Open) (所有打开的活动文件夹的图层)、All in Active Folder (Include Embedded) (所有活动文件夹的图层,包括被嵌入到其他页面中的图层)、All in Project (项目中所有图层)和 Specified (指定图层)。

Graphs 列表: 当 Merge 下拉表设置为 Specified 时,可以用来选择要合并的图形。

Keep Source Graphs 选框: 是否保留原来的 Graph。

Rearrange Layout 选框: 是否将多个图层排列到网格之中,还是以重叠的方式合并图层。

Arrange Settings 项: 可以设置 Number of Rows (设置网格的行数)、Number of Columns (设置网格的列数)、Add Extra Layer(s) for grid (是否为网格创建新的图层)和 Keep Layer Ratio (是否保持坐标图形的高宽比例)。

Spacing (in % of Page Dimension) 项: 可以设置该网格周围的空隙大小。

Page Setup 项: 可以设置整个 Graph 的尺寸大小。

Scale Elements 项: 可以设置 Scale Element (设置尺寸选项) 和 Fixed Factor (当 Scale Elements 下拉表选中 Fixed Factor 时, 可以设置该排列网格的比例大小)。

设置完毕之后, 单击 OK 按钮即可生成多层图形。

4.2 图层管理

4.2.1 调整图层

要调整图层的位置和尺寸, 如图 4.15 所示, 可以通过以下 3 种方法进行:

(1) 单击图层对象之后, 通过直接拖动鼠标调整图层, 这种方法最简单直观, 缺点是不能很精确量化。

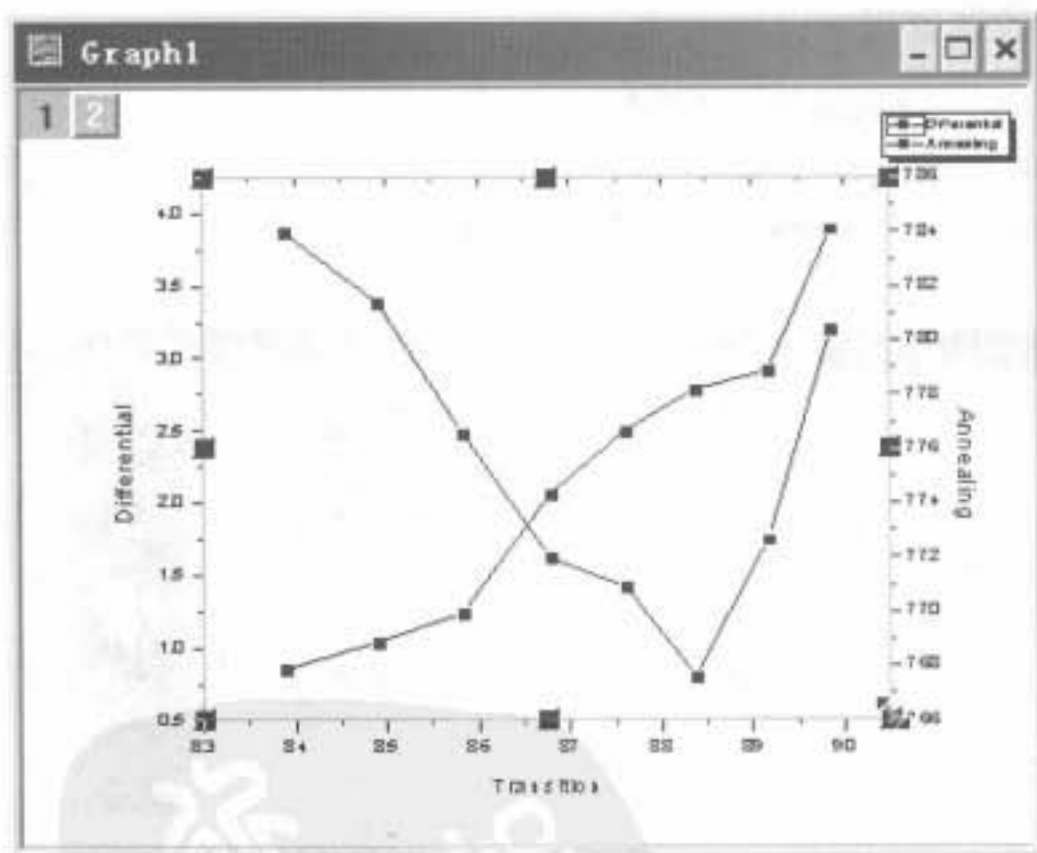


图 4.15 使用鼠标直接调整图层位置和尺寸

(2) 在 Layer Management 对话框中的 Size/Position 标签下调整图层 (详细见上一节中 Layer Management 设置部分)。

(3) 在 Plot Details 对话框中调整图层。其中 Layer Area 项可以设置图层的位置; 这种方法对于精确定位是非常方便的, 其中 Unit 一般保持 % of Page 即可, 这样就可以保持与页面的相对大小, 调整过程中尽量单击 Apply (应用) 而不是 OK (确定) 按钮, 这样就可以在不关闭这个对话框的情况下, 调整图形的位置和大小。Worksheet data,maximum points per curve 输入框可以设置 Worksheet 数据的最大数据点数量; Matrix data,maximum points per dimension X 和 Matrix data,maximum points per dimension Y 输入框可以设置 Matrix 数据的最大数据点数量。设置完毕后单击 Apply 或 OK 按钮即可完成图层调整, 如图 4.16 所示。



图 4.16 图形细节设置对话框

4.2.2 图层的数据管理

1. 通过 Add Plot to Layer 菜单下的命令添加数据

在现有 Graph 的基础上，可以选中需要添加的 Worksheet 的数据，然后选中目标 Graph，通过 Graph → Add Plot to Layer 菜单下的命令添加数据到目标 Graph 中，如图 4.17~图 4.20 所示。

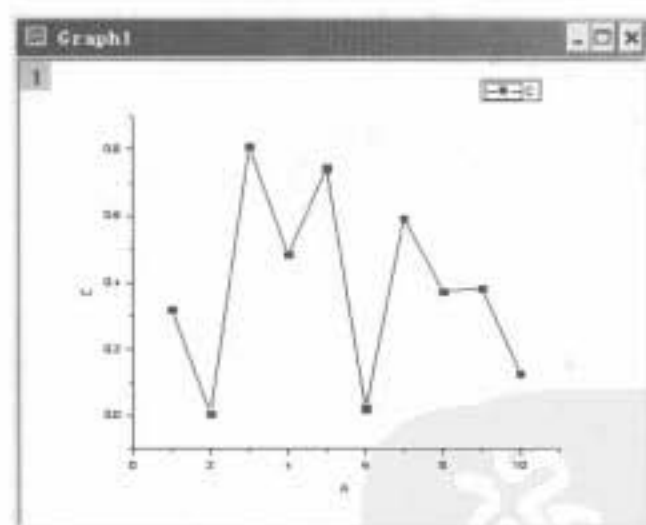


图 4.17 原图

	A(1)	B(1)	C(1)
Long Name			
Units			
Comments			
1	1	0.85522	0.31848
2	2	0.39049	0.00595
3	3	0.44901	0.80698
4	4	0.77041	0.48388
5	5	0.43139	0.74349
6	6	0.11343	0.02226
7	7	0.12061	0.59422
8	8	0.00387	0.37485
9	9	0.21913	0.38224
10	10	0.66055	0.12831
11			
12			

图 4.18 选中数据表中的列

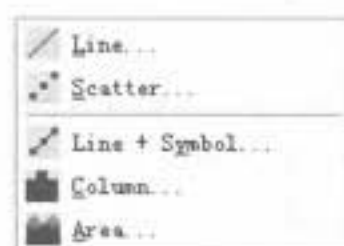


图 4.19 Add Plot to Layer 子菜单

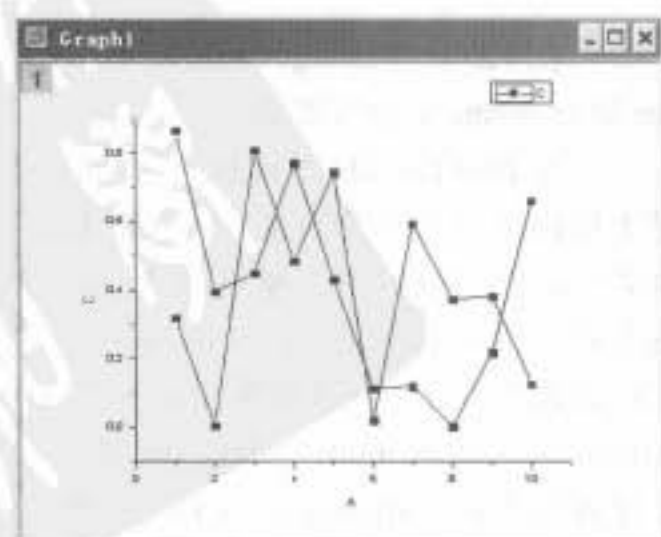


图 4.20 添加新曲线后的图形

2. 通过 Plot Setup 对话框管理 Graph 数据

在选中 Graph 的情况下, 通过 Graph → Plot Setup 命令可以对 Graph 的数据进行管理 (参见第3章)。

3. 通过导入数据管理 Graph 数据

在选中 Graph 窗口的情况下, 可以通过 File → Import 命令将数据导入到 Graph 之中 (参见第2章)。

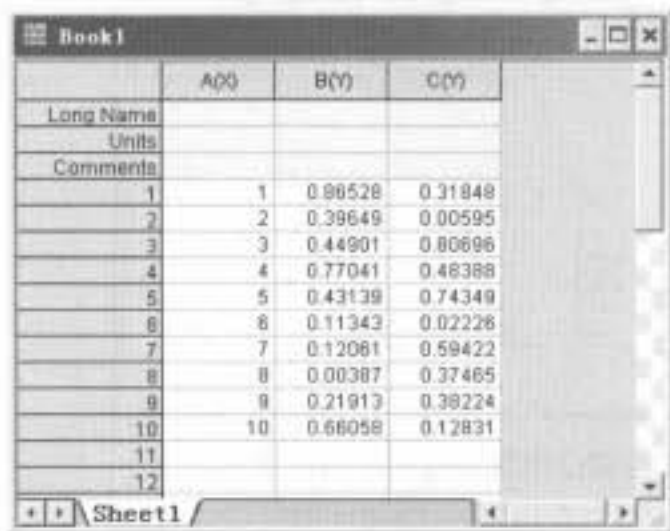
4. 通过 Layer n 对话框管理 Graph 数据

在 Graph 窗口左上角的图层序号上单击右键, 选择 Layer Contents 命令, 可以打开 Layer n 对话框 (参见第3章多条曲线作图操作)。

4.2.3 图层形式的转换

1. 将单层图形转换为多层图形

以下列数据为例, 将单层图形转换为多层图形, 可以按照以下方法进行, 如图 4.21 和图 4.22 所示。



	A(X)	B(Y)	C(Y)
Long Name			
Units			
Comments			
1	1	0.98528	0.31848
2	2	0.39649	0.00595
3	3	0.44901	0.80696
4	4	0.77041	0.48388
5	5	0.43139	0.74349
6	6	0.11343	0.02228
7	7	0.12081	0.59422
8	8	0.00387	0.37465
9	9	0.21913	0.38224
10	10	0.68058	0.12831
11			
12			

图 4.21 作图原数据

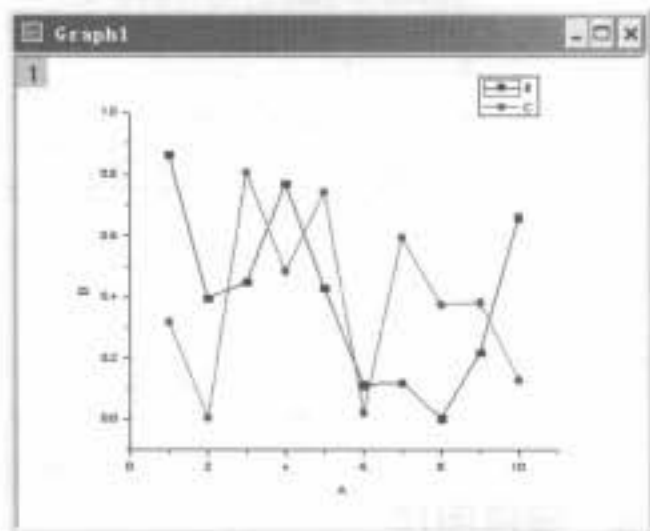


图 4.22 单层双曲线图形

选中 Worksheet, 通过 Plot 菜单下的命令生成单层 Graph。

再选中该 Graph, 单击 Graph 工具栏上面的 Extract to Layers 按钮, 会弹出对话框, 可以设置分解后图层的排列格式: Number of Rows (网格行数) 和 Number of Columns (网格列数), 设置好之后单击 OK 按钮即可将单层图形分解为多层图形, 如图 4.23 所示。

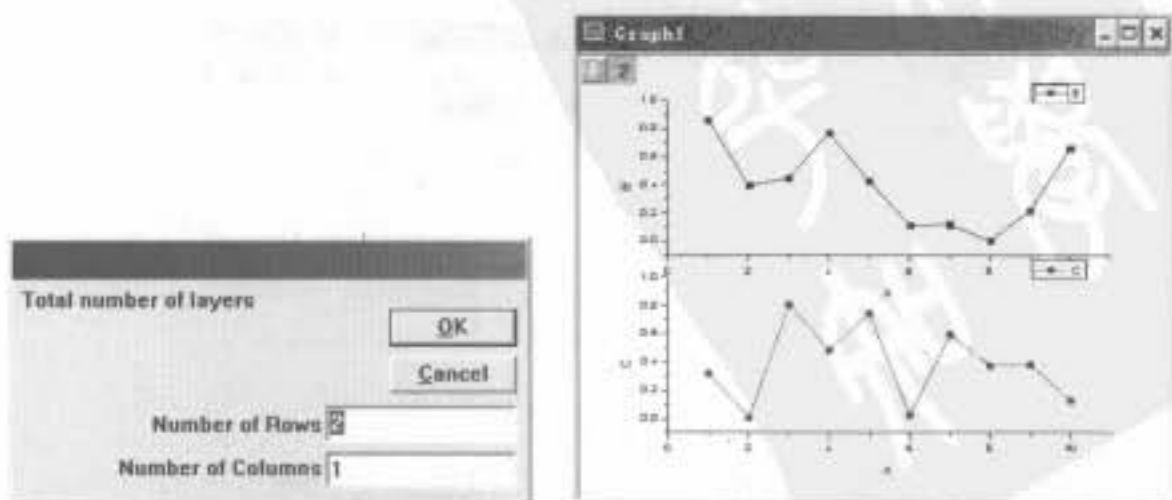


图 4.23 将单层双曲线图形转变为双层图形

2. 将多层图形转换为多个 Graph

要将多层图形分解为多个独立的 Graph，可以在选中需要分解的 Graph 后，单击 Graph 工具栏上面的 Extract to Graphs 按钮打开 Graph Manipulation:layext 对话框，进行相应的设置之后单击 OK 按钮即可完成分解操作。其中可设置的有 Extracted Layers（要分解的图层，以“:”分隔始末图层序号，如“2:4”则为分解 2、3、4 号 3 个图层到独立的 Graph 中）、Keep Source Graph（是否保留原来的 Graph）和 Full Page for Extracted（是否重新计算并显示分解后图形的尺寸大小），如图 4.24 所示。

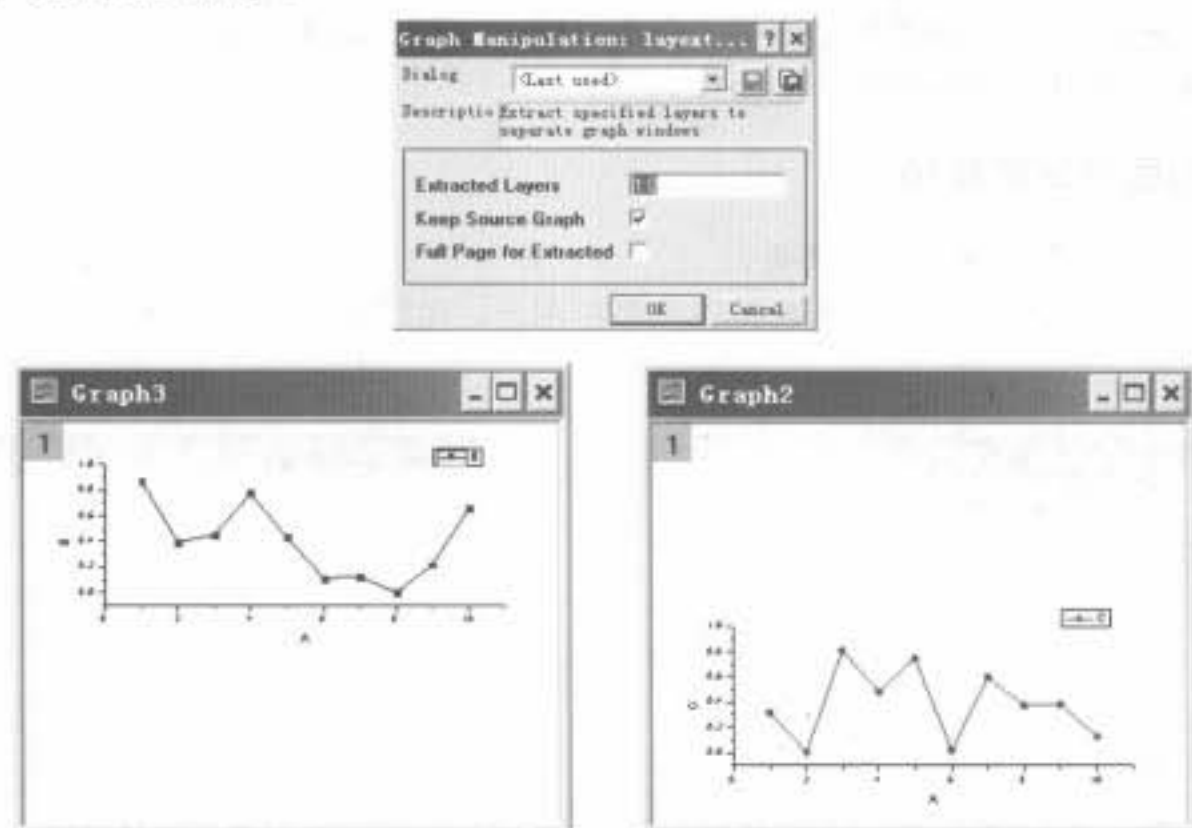


图 4.24 将双层图形分成两个图形窗口但保留原图形的位置和大小

4.2.4 链接图层

如果建立图层之间的链接，那么当其中一个图层的坐标刻度发生变化时，对应的链接层的坐标刻度也随之变化。也就是说，通过图层之间的链接关系，方便同时缩放和调整坐标轴。

要将图层链接起来，可以在选中 Graph 的情况下，通过 Format → Plot 命令，打开 Plot Details 对话框，在 Link Axes Scales 标签下设置。其中 Link 下拉表可以设置要链接的图层序号，X Axis Link 和 Y Axis Link 项则可以设置链接的方式，如图 4.25 所示。

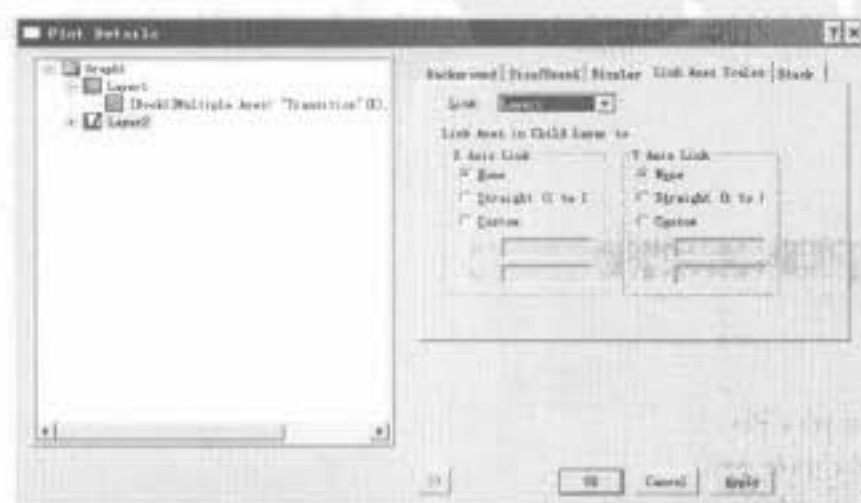


图 4.25 链接图层

4.3 插入和隐藏图形元素

4.3.1 插入图形和数据表

要在图形中插入另一个图形，首先选择一个图形对象，然后进行复制，然后粘贴到目标图形窗口，如图 4.26~图 4.28 所示。

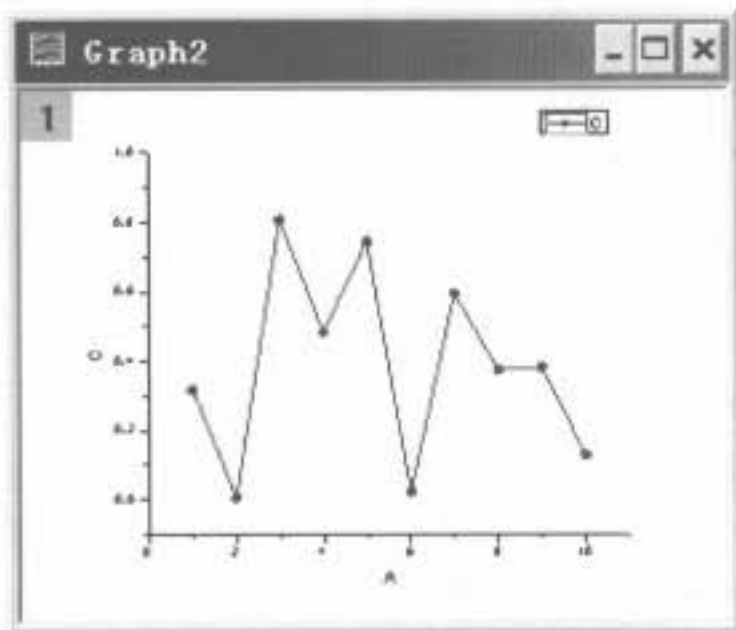


图 4.26 复制的对象

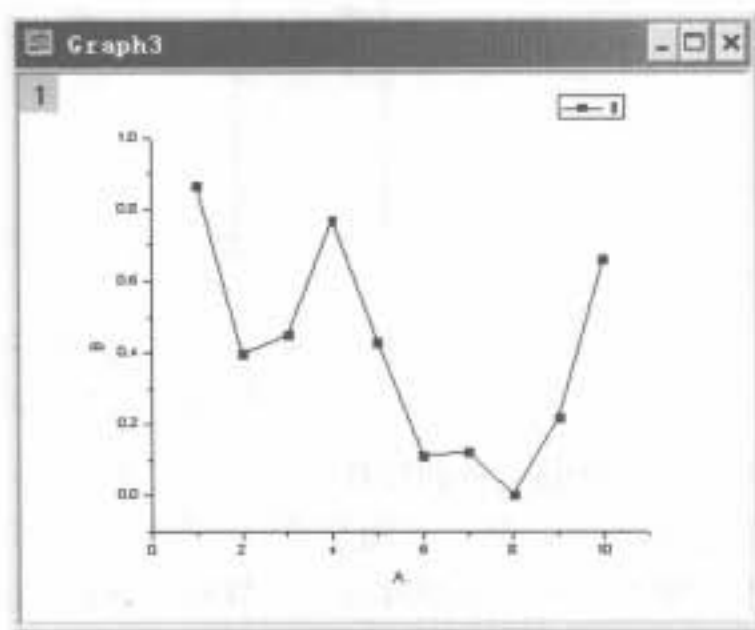


图 4.27 目标图形

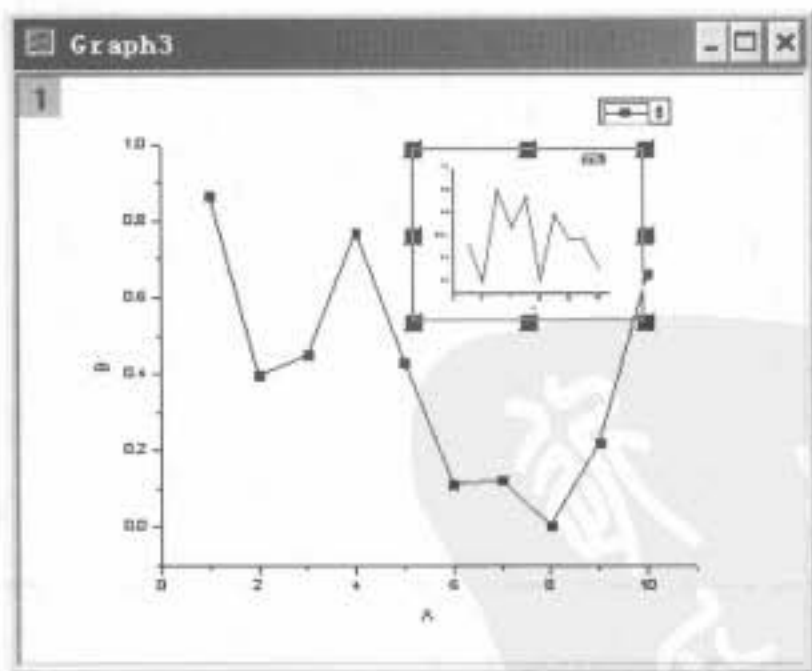


图 4.28 粘贴的结果

复制的方法有两种，分别是使用 Edit 编辑菜单中的 Copy Page 和 Copy 两个命令。前者是指复制整个图形窗口，最终粘贴完成后，除可以对图形进行缩放外，不能再进行编辑，而且也不会随原图的变化而变化，就像是一个绘图对象一样处理，也不会新建图层。

但如果使用 Copy 命令就会有很大不同。使用 Copy 命令进行复制和粘贴，会自动建立新图层，粘贴后各部分的图形对象都可以进行编辑，图形会随着数据的变化而变化，因此这种方法其实是另类的建立图层的方法，如图 4.29 所示。

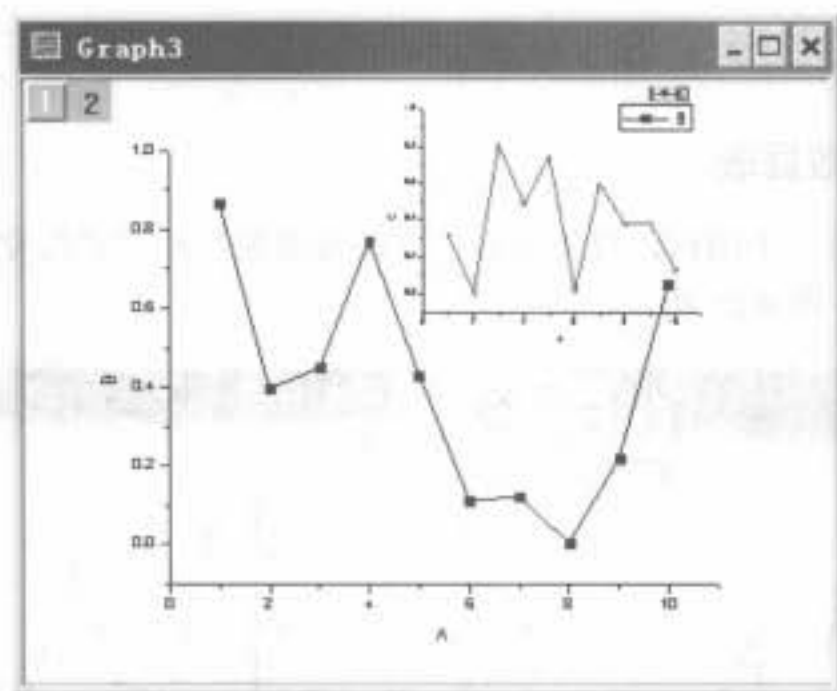


图 4.29 使用 Copy 命令然后粘贴的结果

复制粘贴表格的操作也很简单，首先选中数据表格中的数据（不用全选，只需选中部分单元格即可），然后在图形窗口中粘贴，结果如图 4.30 所示，实现了图、表的混合排版，双击表格可以进一步编辑其中的数据，返回后图形中的表格数据也随之改变。

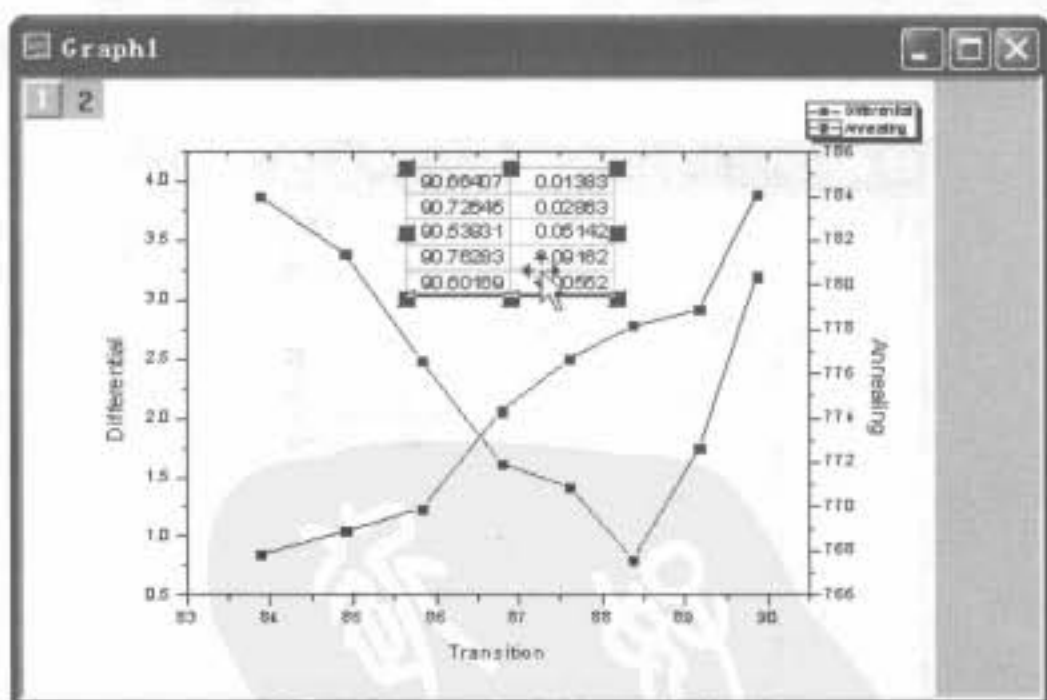


图 4.30 在图形中插入数据表

4.3.2 隐藏或删除图形元素

要设置 Graph 里面需要显示的内容，可以在选中 Graph 的情况下，通过 View → Show 菜单下的命令，选择需要显示的内容，可选的内容有：

- (1) Layer Icons: 图层标记。
- (2) Active Layer Indicator: 活动图层标记。
- (3) Axis Layer Icons: 图层坐标标记。
- (4) Object Grid: 对象网格。
- (5) Layer Grid: 图层网格。

- (6) Frame: 框架。
- (7) Labels: 标签。
- (8) Data: 数据。
- (9) All Layers: 所有图层。

另外, 在 Plot Details 对话框的 Display 标签下的 Show Elements 项中, 也可以设置要显示的 Graph 内容, 如图 4.31 和图 4.32 所示。

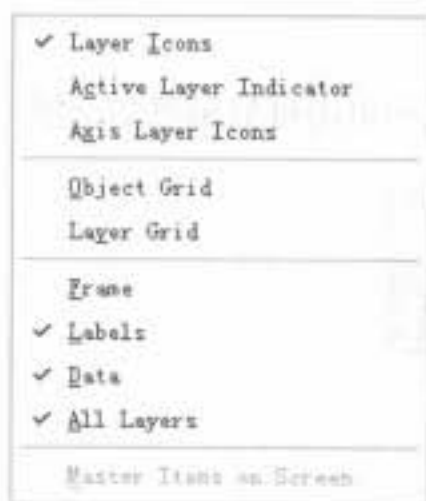


图 4.31 图形元素显示选项



图 4.32 图形细节设置

要删除图层, 只要右键单击要删除图层的图层标记, 执行 Delete Layer 命令即可, 如图 4.33 所示。

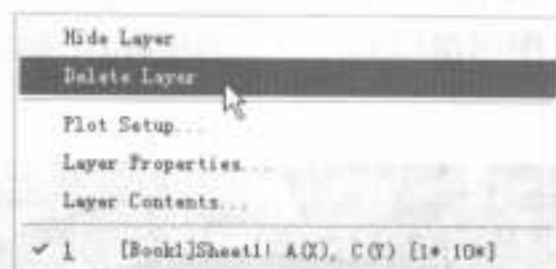


图 4.33 图层右键快捷菜单

4.4 图形工具

除了上面介绍的通过增加图层绘制复杂图形外, 一些有用的图形工具对于作图或辅助作图也是非常有用的。


4.4.1 使用 Graph 工具栏





图 4.34 图形工具栏


: 对页面进行放大、缩小和整页显示。


: 缩放, 根据当前图形中的数据对图形进行自动缩放, 是图形最常用的一个操作之一, 不过更好的选择是使用其快捷键, 即 Ctrl + R。


: 将多曲线图形分成层、将多层分成多个图、合并多个图形。


: 图层操作, 详见上节。

: 彩色刻度, 用于 3D 等高线图形。


: 建立新的图例。

: 增加一个比例尺。

: 插入系统时间。

: 插入空白表格。

4.4.2 使用 Tools 工具栏

Tool 工具栏如图 4.35 所示。图标旁边若有  标记, 用鼠标单击可显示更多功能。

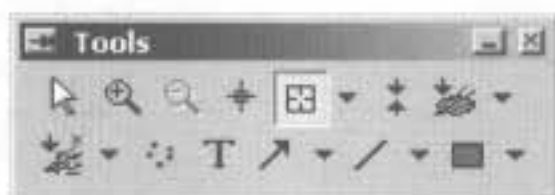




图 4.35 Tools 工具栏

 Pointer 可以用于选择对象, 也用于取消其他工具。

 Zoom In 可以放大图形, 只要按住鼠标左键拖动鼠标选择要放大的区域即可, 注意此处的放大缩小是指放大缩小坐标轴刻度, 因为坐标刻度变了, 图形才跟着放大缩小, 与上面 Graph 工具栏的图形整页缩放在意义上是完全不同的。

 Zoom Out 缩小图形, 使坐标刻度回到原来的设定处。



 Screen Reader 可以读取图形窗口上任意点的坐标, 坐标值通过 Data Display 窗口显示, 如图 4.36 所示。



图 4.36 Data Display 面板

 Data Reader 可以准确读取数据点的坐标, 即源数据的值, 当用鼠标单击时, 鼠标会自动选中最近的数据点, 并显示如下 Data Info 信息框, 这与 Screen Reader 是完全不同的, 如图 4.37 所示。

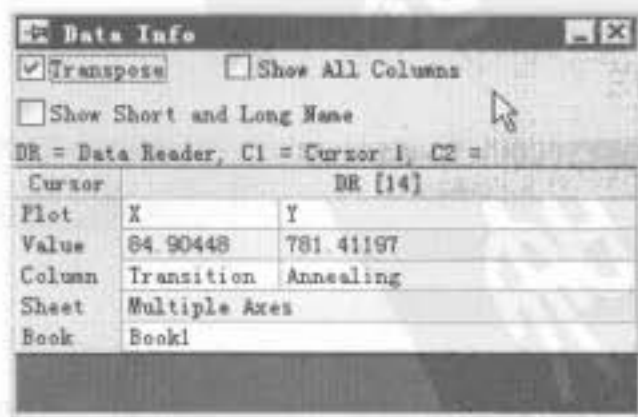







图 4.37 Data Info 面板


 Annotation 可以给数据点添加注释, 这个工具对于标注数据点的值是很有用处的, 例如可以使用这个工具标注峰对应的坐标值。

 Cursor 可以给数据点添加可移动的指针。


 Data Selector 可以选择数据段, 只要拖动数据线起始的点即可。

 Selection on active plot 可以选择当前选中图形的某个区域的数据点。


 Selection on all plots 可以选择所有图形的某个区域的数据点。


 Add masked points to active plot 可以隐藏当前选中图形的某个区域的数据点。

 Add masked points to all plots 可以隐藏所有图形的某个区域的数据点。


 Remove masked points from active plot 可以取消隐藏当前选中图形的某个区域的数据点。


 Remove masked points from all plots 可以取消隐藏所有图形的某个区域的数据点。

 Draw Data 可以自己绘制数据点, 在这个模式下只要单击画布即可绘制数据点, 点间会自动连线, 完成后按 Esc 键退出, 用这个方法绘制的数据点并不是“图形”, 而是数据, 会自动建立工作表储存这些数据, 可修改其图形特性。


 Text Tool 可以输入文本。

 Arrow Tool 可以绘制带箭头的直线, 只要按住鼠标左键拖动鼠标即可。

 Curved Arrow Tool 可以绘制带箭头的曲线, 只要按顺序单击画布上的 3 个点即可, 通常用于标注。


 Line Tool 可以绘制直线, 只要按住鼠标左键拖动鼠标即可。


 Polyline Tool 可以绘制折线, 只要按顺序单击画布上的点即可, 完成后按 Esc 键退出。

 Freehand Draw Tool 可以绘制任意线条, 只要按住鼠标左键拖动鼠标即可。

 Rectangle Tool 可以绘制矩形, 只要按住鼠标左键拖动鼠标即可。

 Circle Tool 可以绘制椭圆形, 只要按住鼠标左键拖动鼠标即可。

 Polygon Tool 可以绘制多边形, 只要按顺序单击画布上的点即可, 完成后按 Esc 键退出并生成多边形。





 Region Tool 可以绘制任意形状, 只要按住鼠标左键拖动鼠标即可, 放开左键时起始和结尾的点会以直线连接起来。

4.4.3 使用 Mask 工具栏

Mask 工具栏如图 4.38 所示。



图 4.38 Mask 工具栏

所谓 Mask 即屏蔽, 就是让部分数据隐藏起来, 这样并不需要删除原数据, 而是不让这些数据作图而已。关于数据点的屏蔽, 需要使用到 Tools 工具栏中的     几个图标, 上面已经有介绍, 下面介绍 Mask 工具栏中的几个图标的含义, 注意这几个图标的操作一些在 Graph 窗口而另一些要在 Worksheet 中使用, 屏蔽的数据点可以是一个点, 也可以是一个范围, 如图 4.39 所示。

Long Name	Units	Comments	A(X)	B(Y)	C(Y)
			1	0.86528	0.31848
			2	0.39649	0.00595
			3	0.44901	0.80696
			4	0.77041	0.48388
			5	0.43139	0.74349
			6	0.11343	0.02226
			7	0.12061	0.59422
			8	0.00387	0.37465
			9	0.21913	0.38224
			10	0.66058	0.12831
			11		
			12		

图 4.39 被屏蔽的数据在数据表用红色表示

- : 屏蔽数据。
- : 取消屏蔽。
- : 改变屏蔽点的颜色（防止颜色与原来曲线颜色相同）。
- : 隐藏或显示被屏蔽的数据点，如图 4.40 所示。

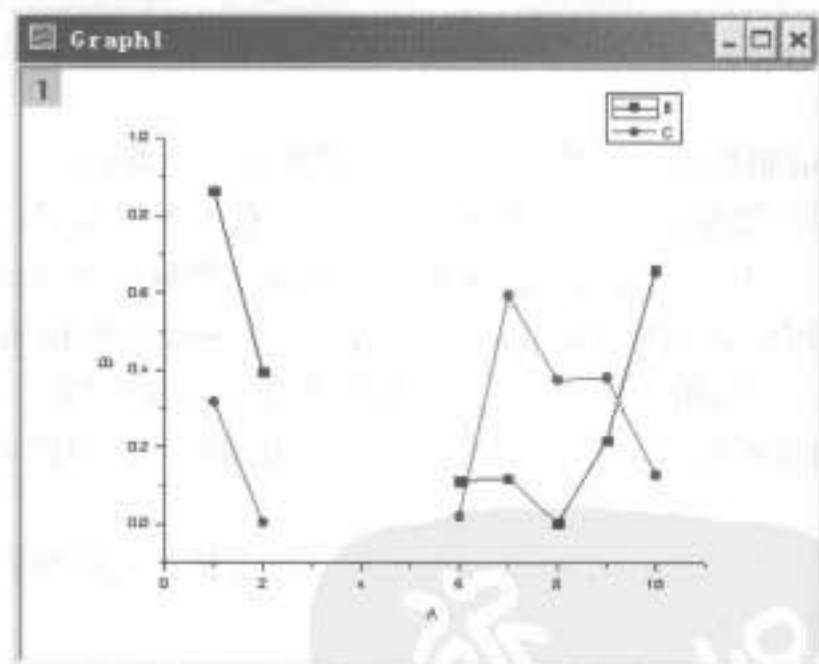


图 4.40 隐藏数据点后作图的结果

- : 交换屏蔽数据，即原来屏蔽的取消屏蔽，原来没屏蔽的则屏蔽。
- : 确认或取消屏蔽。

要说明的是，如果隐藏屏蔽的数据点，则在做线图时会出现断线的问题，解决的方法是在 Plots Details 对话框中修改线图的 Connect 连接方式，使其平滑的穿越被隐藏的数据点。

除了以上使用 Mask 操作外，关于数据点的操作，值得一提的是 Data 菜单中的两个强力处理数据点的指令：

1) Remove Bad Data Points: 在图形中移除坏数据，即判断出一些数据远远偏离正常值是实验误差时，可以使用这个命令删除这些数据点，这个与屏蔽不同，会直接删除数据表中的原始数据。另外实验数据是否是误差需要仔细研究，因此本操作要谨慎，如图 4.41 和图 4.42 所示。

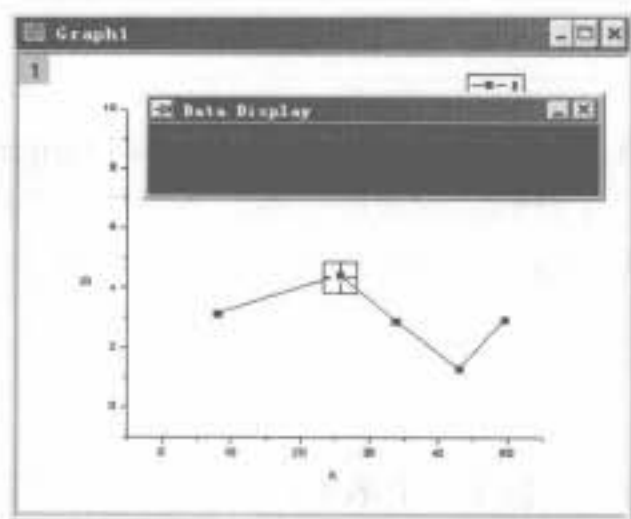


图 4.41 移除“坏”数据点

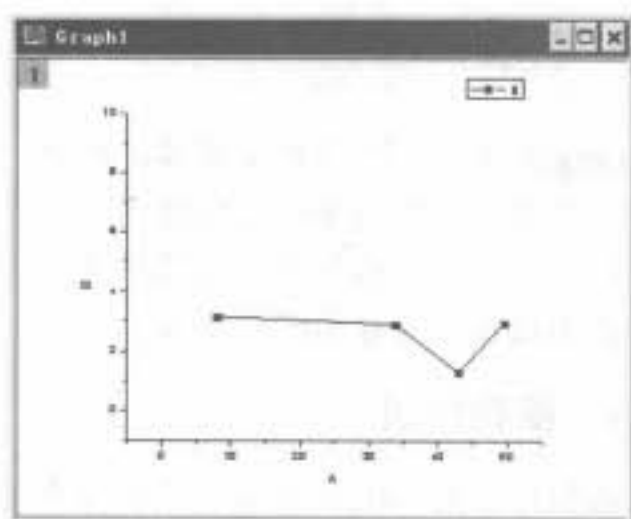


图 4.42 移除数据点后的结果

2) Move Data Points: 移动数据点, 利用鼠标自由移动点的位置, 这个操作会同时修改数据表中的原始数据, 是否必须使用, 判断的标准与移除数据点相同, 如图 4.43 所示。

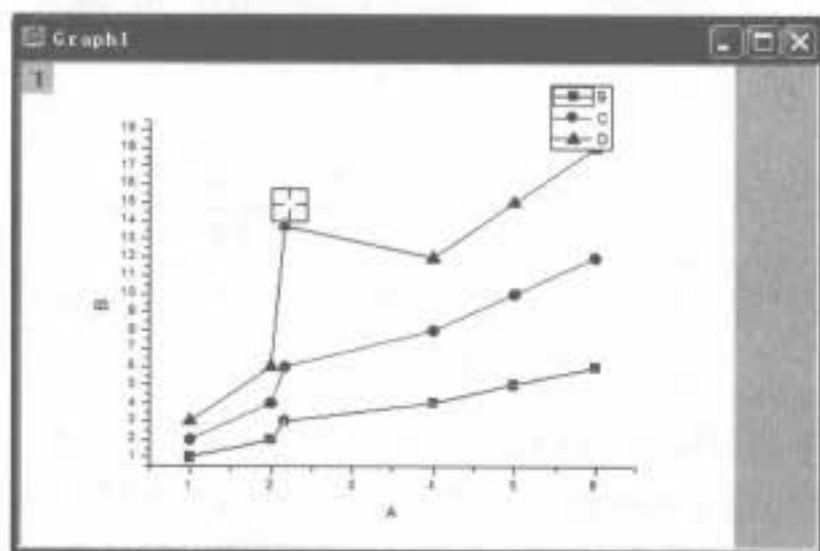


图 4.43 使用鼠标移动数据点

4.4.4 对象管理

对象管理工具栏如图 4.44 所示。



图 4.44 对象管理工具栏

选中对象之后, 可以通过 Object Edit 工具条对它们进行管理, 主要是对齐和叠放关系, 这个工具在 Layout (布局) 窗口中有重要的作用。

分别是左对齐和右对齐。

分别是上对齐和下对齐。

分别是垂直中对齐和水平中对齐。

分别是对选中的对象截取相等宽度和长度。

是对 Graph 对象的排列顺序进行调整。

是对 Worksheet 对象的排列顺序进行调整。

则是对对象进行分组, 被编为同一组的对象, 一起当作一个对象对待。

4.5 各类二维图形简介

Origin 中二维图形种类繁多,不能一一详细介绍。本节以列表和图形的形式将 Origin 中各类二维图形罗列出来,方便读者有一定的印象。除了介绍的这些图形外,不同类型的图形还可以进一步组合或复合生成新的图形形式。如果希望将新的图形形式固定下来,则可以将图形详细设定后保存为图形模板。

4.5.1 函数作图

函数作图是 Origin 中唯一不需要有原始数据的图形。新建一个函数图形窗口,选择 Graph → add Function Graph 命令,弹出对话框,如图 4.45 所示。

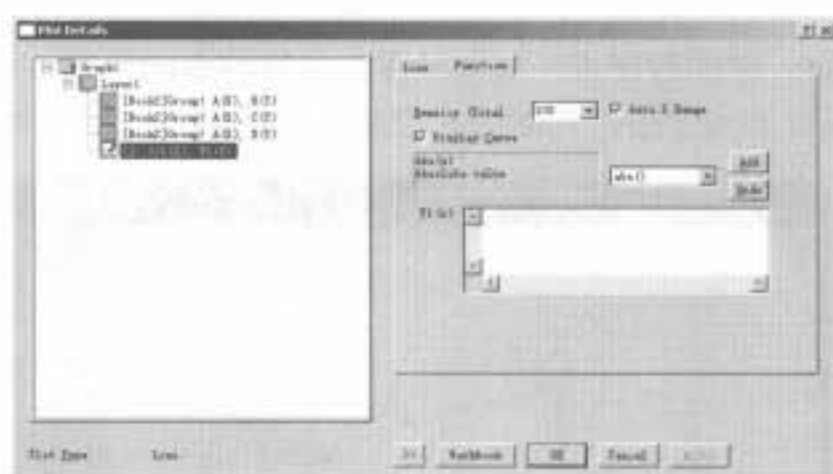


图 4.45 Plot Details 对话框

在 Density 后面的下拉列框中选择数据个数,可自行填写或选择;选中 Auto X Range,则系统默认 X 值,否则将出现文本框制定 X 值的范围;在函数下拉列框中的有大量的数学函数和统计函数可供选择,选中函数后单击后面的 Add 按钮即可将函数添加到 Graph 中,或者直接在 Fn(x) 中输入函数表达式,之后单击 OK 或 Apply 按钮即可生成图形,如图 4.46 所示。

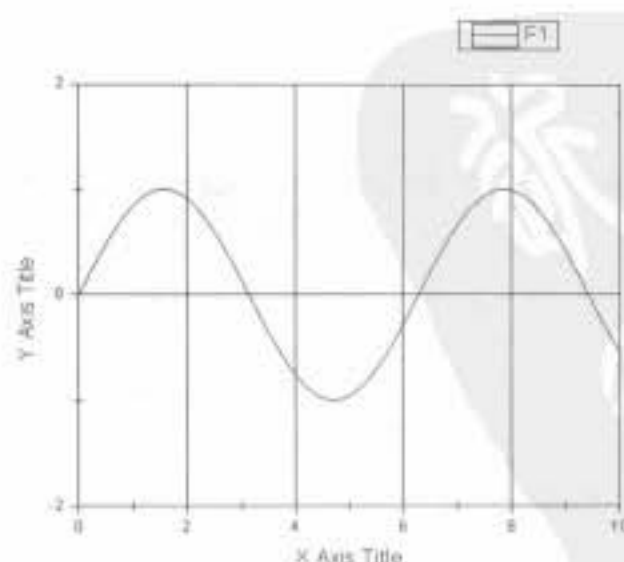


图 4.46 通过函数绘制正弦曲线

4.5.2 其他二维图形

在 Origin 里面,主要的 2D 图形包括以下 30 多种(首先选择要作图的数据列并进行设置,然后使工具栏上的相关按钮或者 Plot 菜单上的相关命令,即可得到这些图形):

(1) 2D Scatter: 散点图形, 如图 4.47 所示。

(2) Line: 线型图, 如图 4.48 所示。

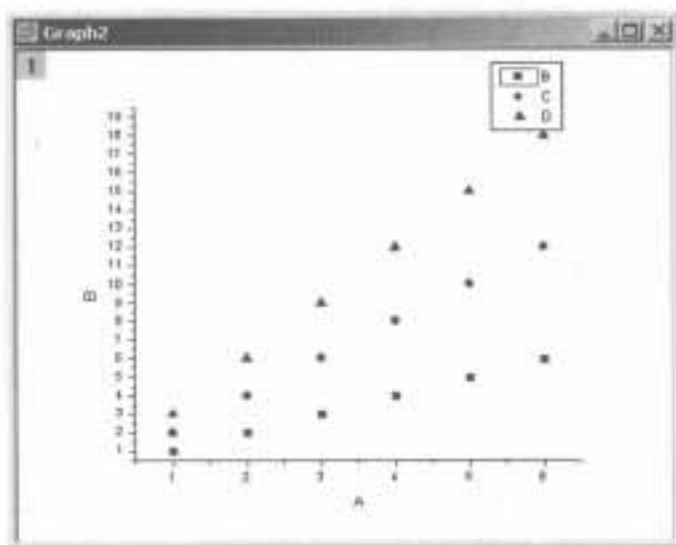


图 4.47 散点图

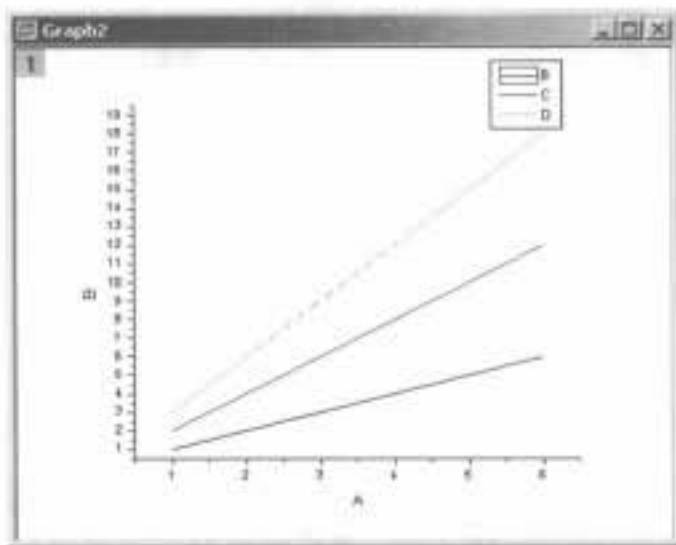


图 4.48 线图

(3) Line+Symbol: 点线图, 如图 4.49 所示。

(4) Spline Connected: 平滑曲线的点线图, 如图 4.50 所示。

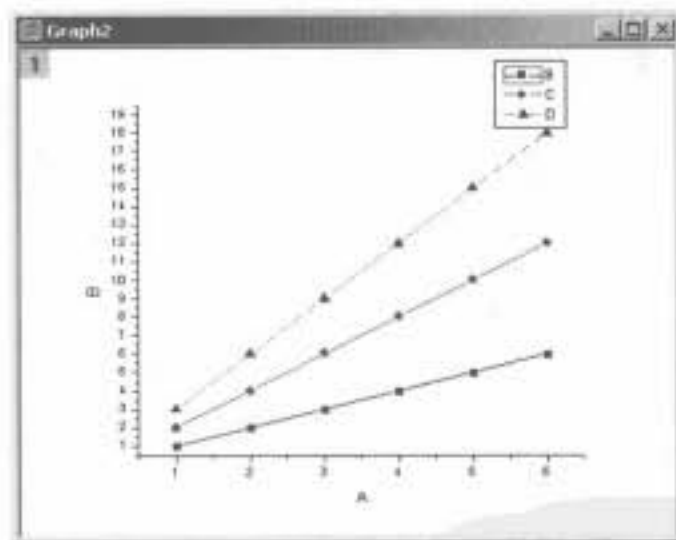


图 4.49 点线图

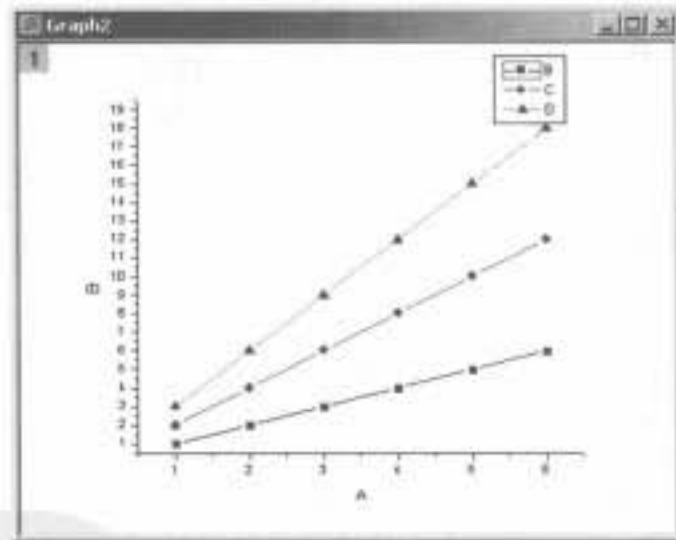


图 4.50 平滑曲线的点线图

(5) 2 Point Segment: 按每 2 点进行分组显示, 如图 4.51 所示。

(6) 3 Point Segment 按每 3 点进行分组显示, 如图 4.52 所示。

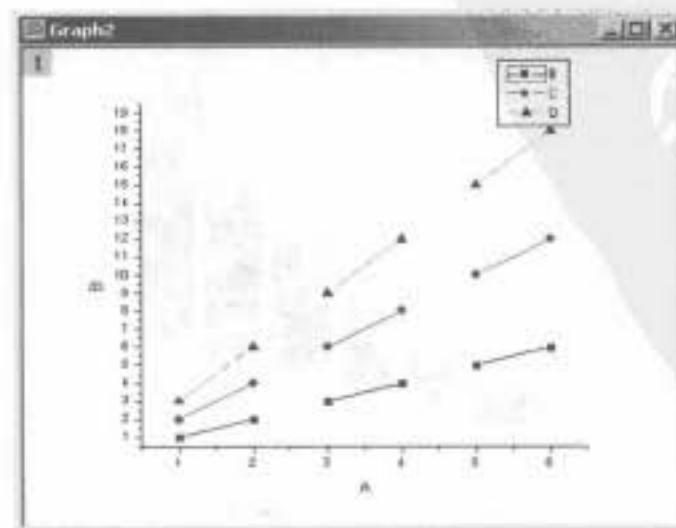


图 4.51 按每 2 点进行分组显示

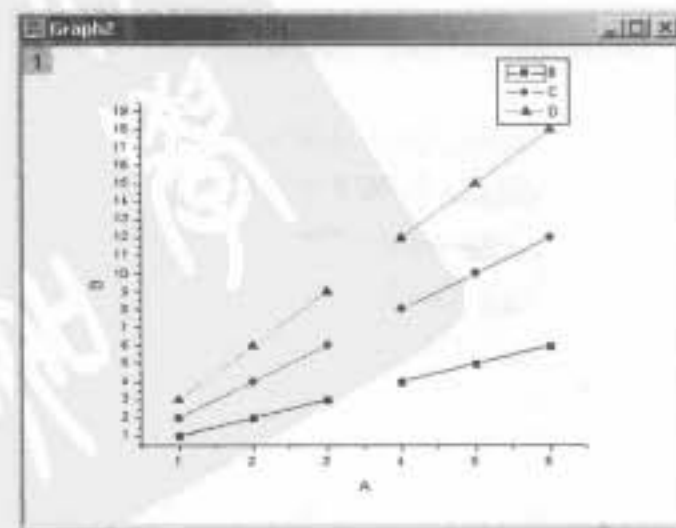


图 4.52 按每 3 点进行分组显示

(7) Vertical Step: 垂直折线图, 如图 4.53 所示。

(8) Horizontal Step: 水平折线图, 如图 4.54 所示。

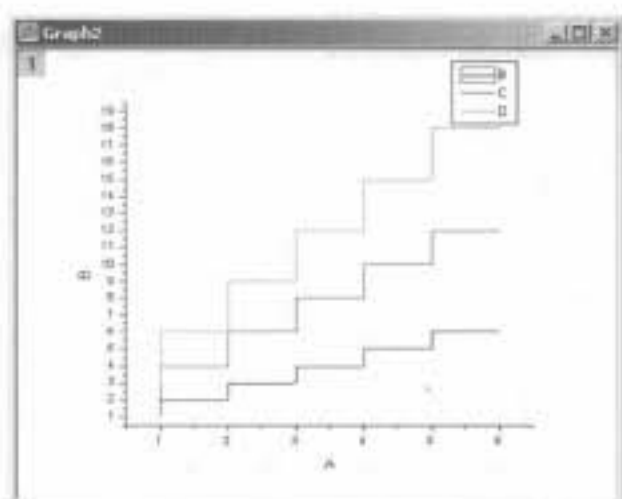


图 4.53 垂直折线图

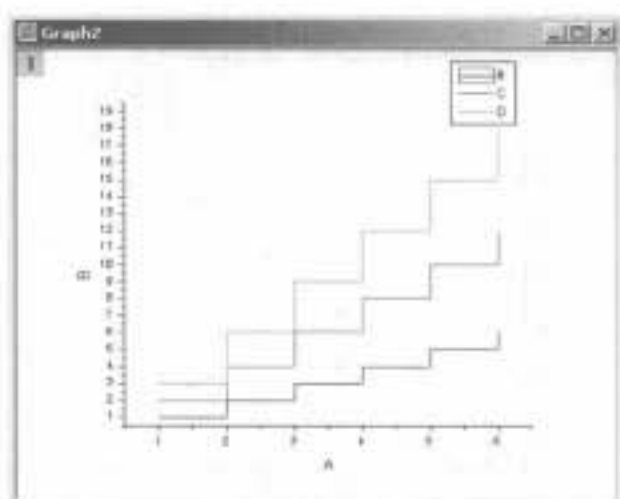


图 4.54 水平折线图

(9) Vertical Drop: 垂线图, 从数据点向 X 轴投下直线, 如图 4.55 所示。

(10) Line Series: 将不同 Y 列的点, 按顺序用线连起来, 图为 3 条 Y 轴的情况下生成的图形, 如图 4.56 所示。

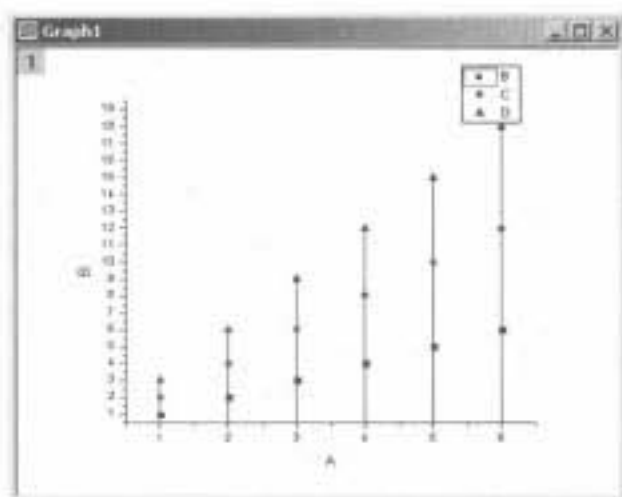


图 4.55 垂直线, 从数据点向 X 轴投下直线

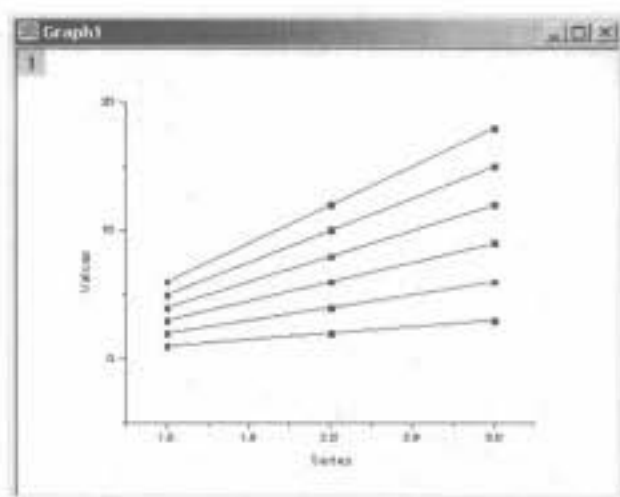


图 4.56 3 条 Y 轴情况下生成的图形

(11) Bar、Column: 条状图, 如图 4.57 所示。

(12) Floating Bar、Floating Column: 与普通条状图相比, 它的作用是突出显示不同 Y 列之间的差距, 如图 4.58 所示。

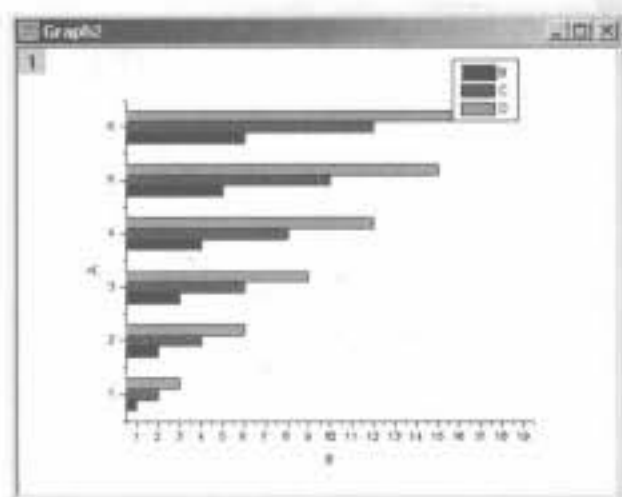


图 4.57 条状图

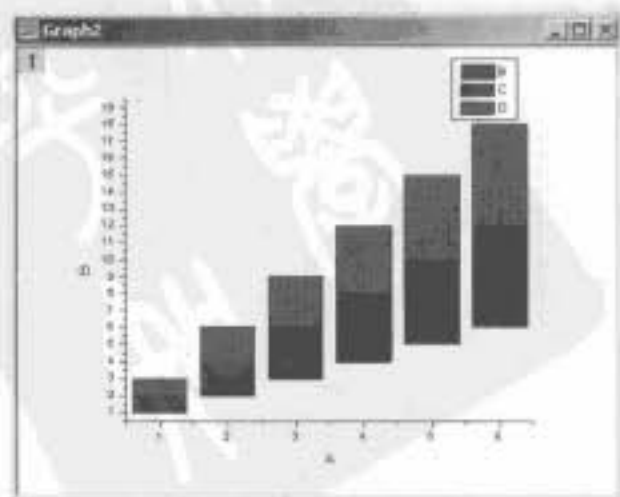


图 4.58 浮动柱状图

(13) Stack Bar、Stack Column: 条状图的一种, 也是为了突出差距, 如图 4.59 所示。

(14) Y Error Bar: 加入了 Y 轴误差修正的图, 如图 4.60 所示。

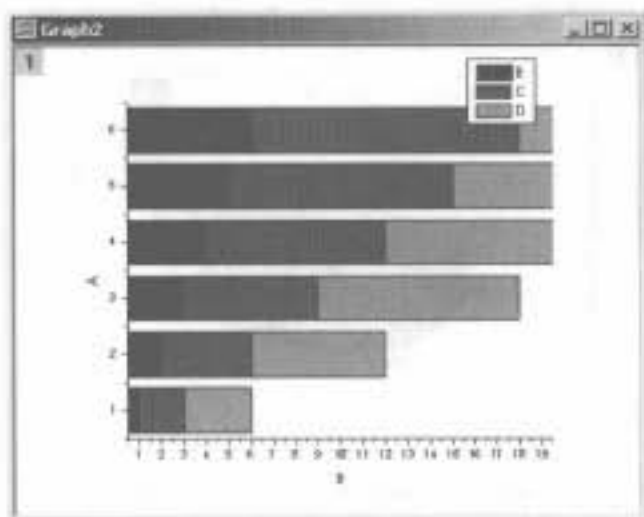


图 4.59 堆叠条状图

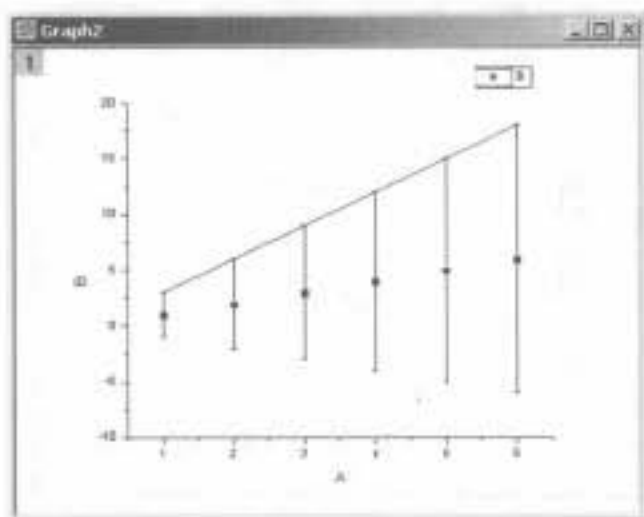


图 4.60 加入 Y 轴误差修正的图

(15) XY Error Bar: 加入了 X、Y 轴误差修正的图, 如图 4.61 所示。

(16) Area: 用于比较不同列所占的区域大小, 如图 4.62 所示。

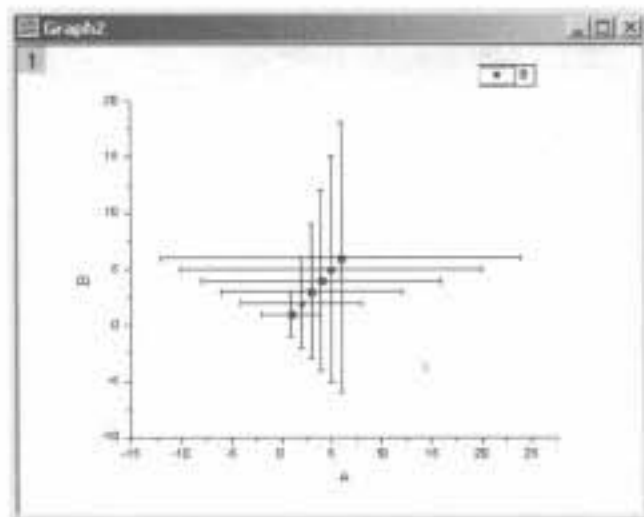


图 4.61 加入 X、Y 轴误差修正图

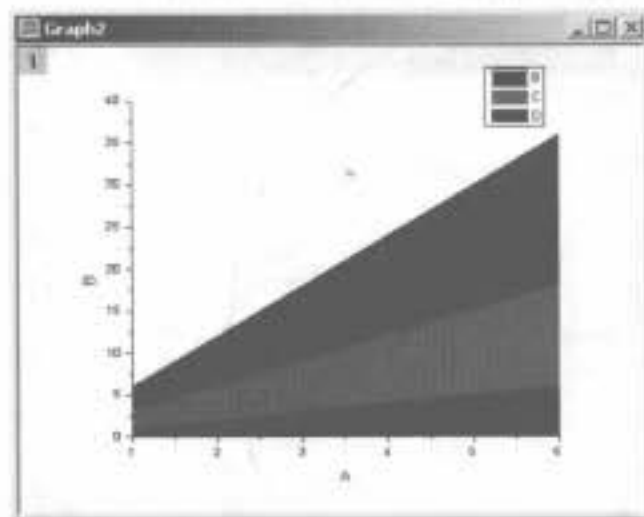


图 4.62 显示不同列所占的区域大小

(17) Fill Area: 用于显示不同列所包围的区域大小, 如图 4.63 所示。

(18) Polar: 用极坐标来显示图形, 如图 4.64 所示。

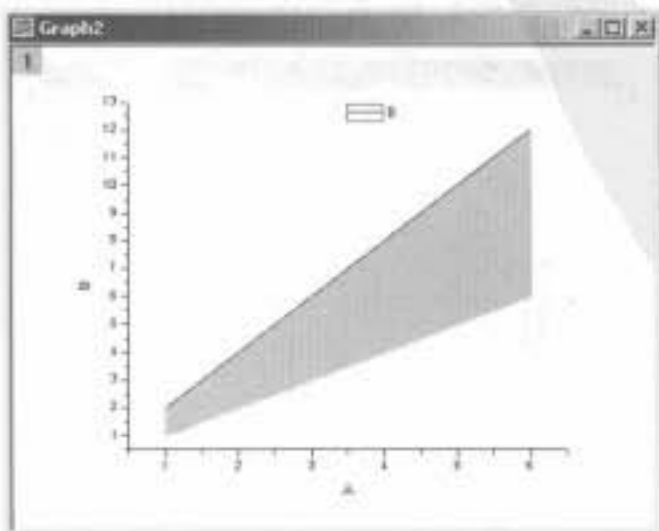


图 4.63 显示不同列所包围的区域大小

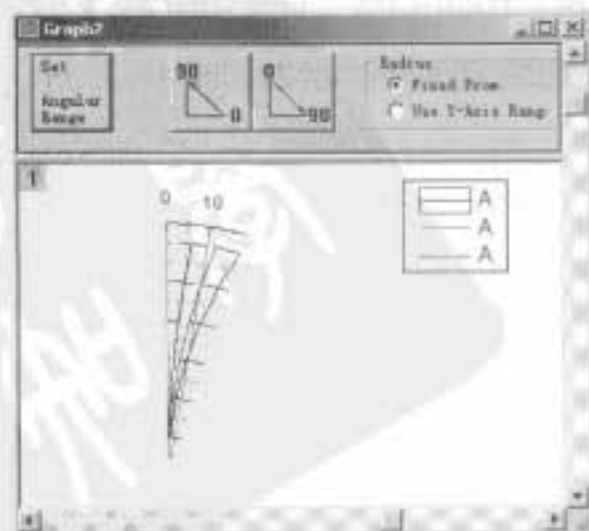


图 4.64 用极坐标来显示图形

(19) 2D Waterfall: 用于比较不同数据集的变化情况, 如图 4.65 所示。

(20) Pie Charts: 主要用于比较数据所占份额的大小, 如图 4.66 所示。

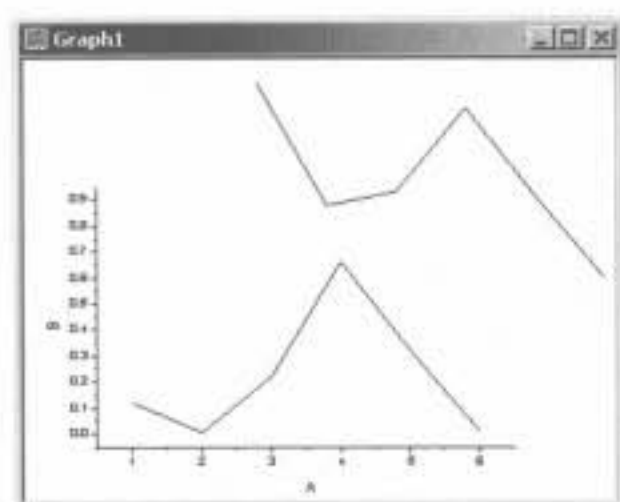


图 4.65 比较不同数据集的变化情况

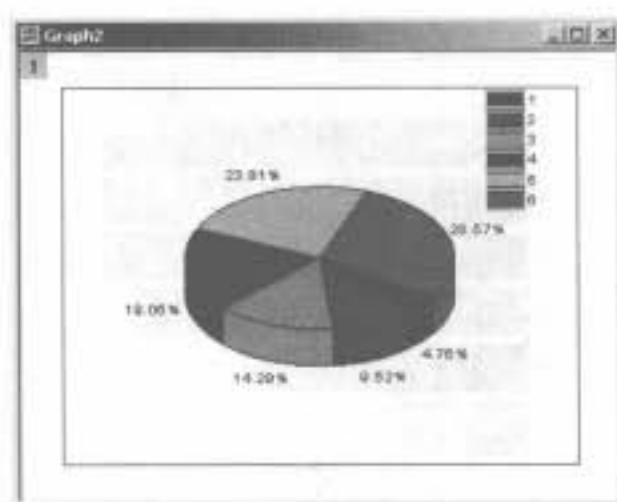


图 4.66 比较数据份额大小

(21) Smith Charts: Smith 图, 如图 4.67 所示。

(22) X, Y, Angle, Magnitude Vector: 需要输入 X、Y、A (角度)、M (长度) 值, 主要用来表示向量, 如图 4.68 所示。

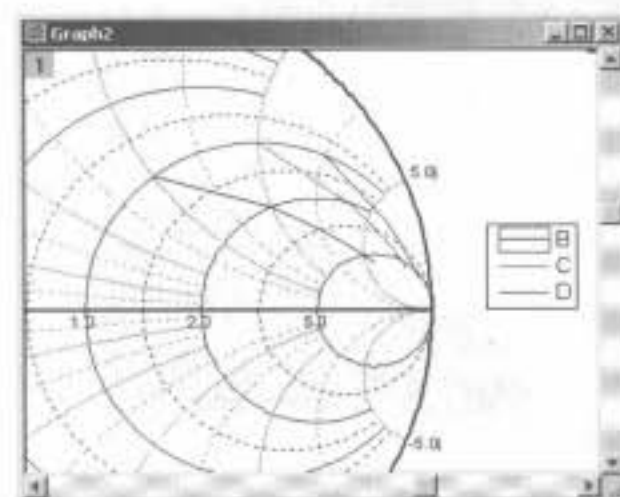


图 4.67 Smith 图

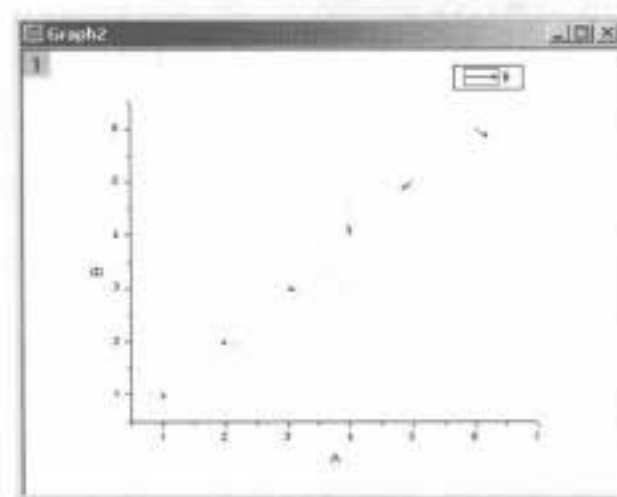


图 4.68 坐标值

(23) X, Y, X, Y Vector: 也是用于表示向量, 不过是通过 2 个数据点 (X1, Y1)、(X2, Y2) 来表示, 如图 4.69 所示。

(24) High-Low-Close Charts: 用于显示最大最小值的差距, 如图 4.70 所示。

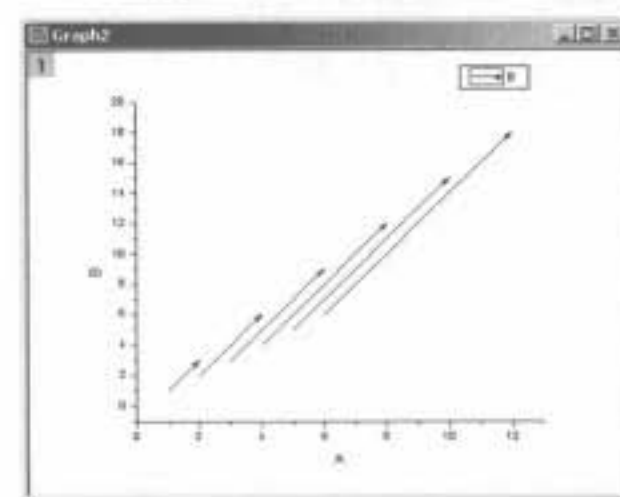


图 4.69 向量图

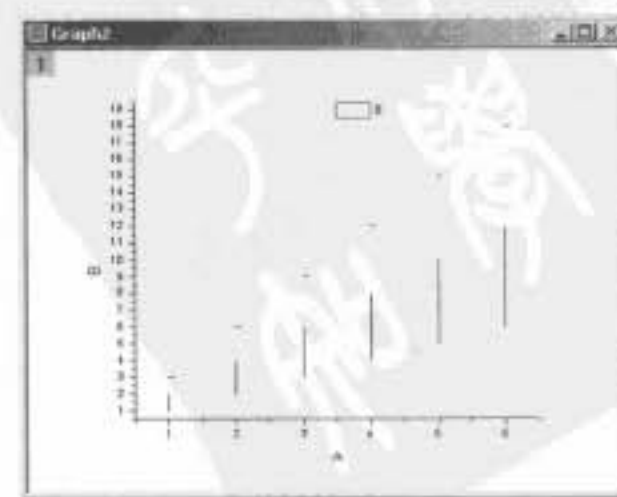


图 4.70 显示最大最小值的差距

(25) Ternary: 在三角系中显示数据, 如图 4.71 所示。

(26) 4 Panel Graph: 可以同时显示最多 4 个图形; 9 Panel Graph 则是 9 个图形, 如图 4.72 所示。

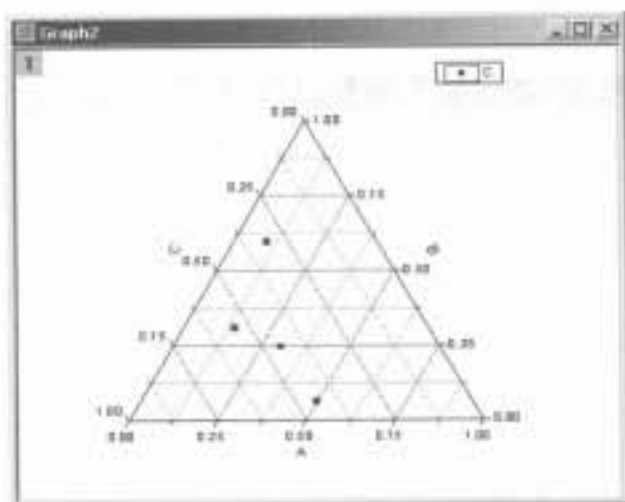


图 4.71 三角坐标系

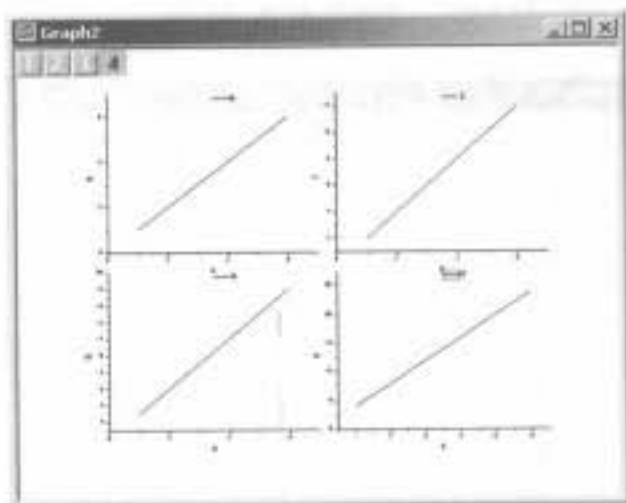


图 4.72 4 格图

(27) Double Y Axis: 在双重 Y 轴坐标系中显示数据, 如图 4.73 所示。

(28) Horizontal 2 Panel、Vertical 2 Panel: 同时显示 2 个图形, 便于对比, 如图 4.74 所示。

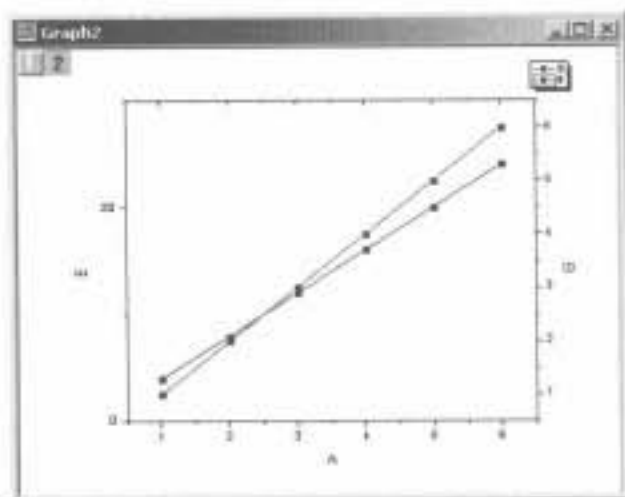


图 4.73 双 Y 轴

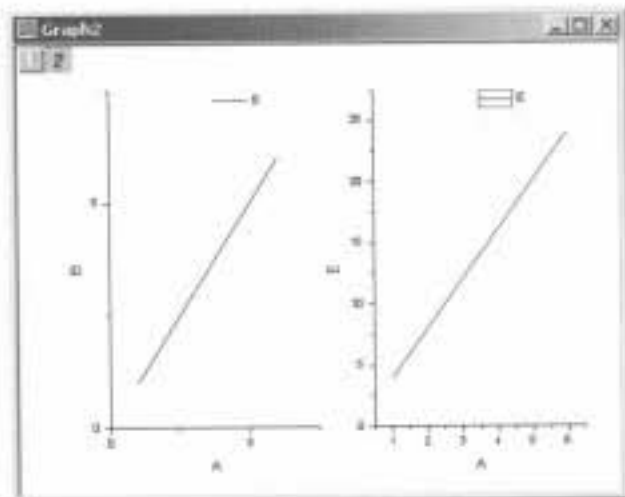


图 4.74 水平双格图

(29) Stack: 垂直排列 4 个图形, 便于对比, 如图 4.75 所示。

(30) Color Mapped: 彩色散点图, 颜色的深浅也表示了一组数据的大小, 如图 4.76 所示。

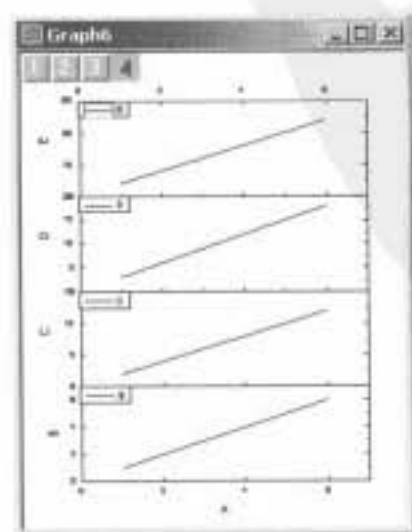


图 4.75 堆叠图

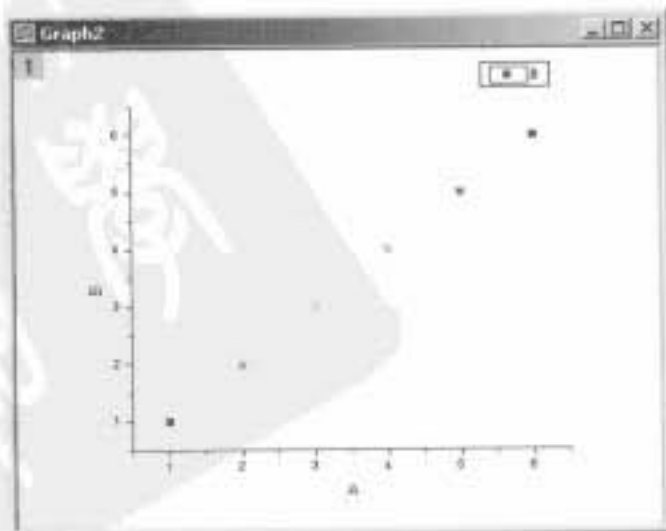


图 4.76 彩色散点图

(31) Indexed Size (Bubble) and Color Map: 比起彩色散点图, 它还加入了点的大小这个变量, 也用来表示一组数据的大小, 如图 4.77 所示。

(32) Indexed Size (Bubble): 去掉了彩色, 便于在黑白环境下使用, 但是也减少了一组数据的表示功能, 如图 4.78 所示。

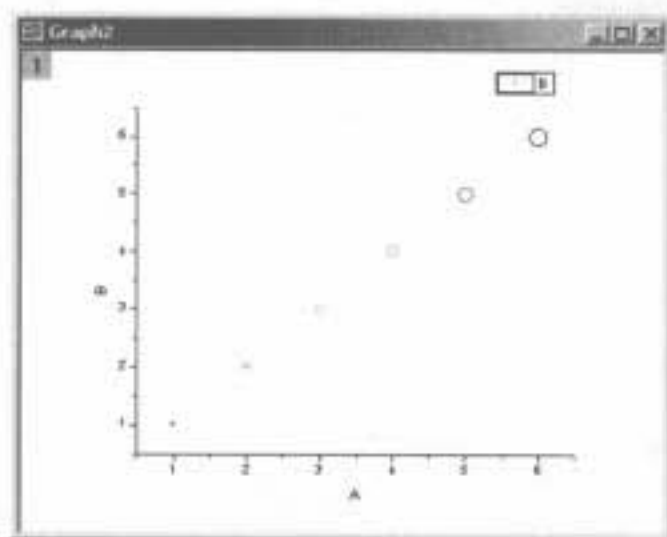


图 4.77 Bubble and ColorMap

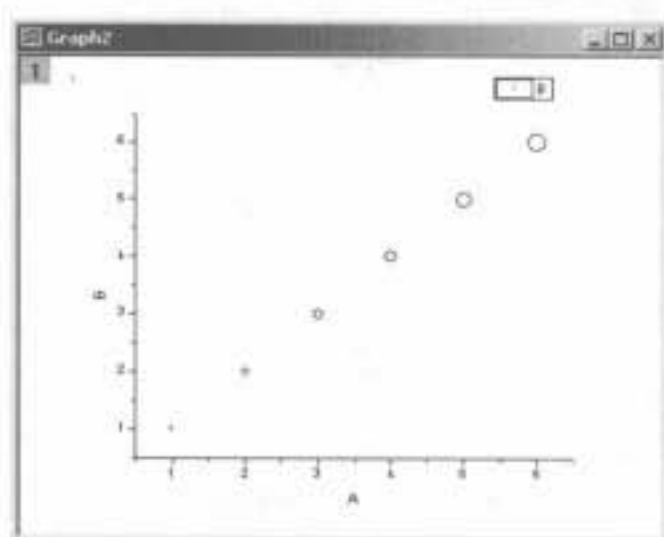


图 4.78 Bubble

本章要点


- 矩阵数据窗口
- 三维数据转换
- 三维作图设置
- 三维图形介绍

三维立体图形可以分成两种，一种是具有三维外观的二维图形，如 3D Bar 三维柱图、3D Pie Chart 三维饼图；另一种是具有三维空间数据，即必须有 XYZ 三维数据的图形，典型的如 3D surface 三维表面图、3D frame/wire 三维线框图等；有一些看起来只是二维的图形，如 2D contour 等高线图，其实也是三维图形。这些三维图形的建立，通常需要使用到 Matrix 矩阵数据，而 Matrix 数据通常从 XYZ 数据转换自来。因此，在介绍 3D 绘图之前，有必要先来介绍一下 Matrix 矩阵窗口及其操作。

5.1 矩阵数据窗口

5.1.1 创建 Matrix 窗口

通过 File → New 命令可以新建一个 Matrix，默认值为 32×32 大小，这是新建一个 Matrix 窗口，然后自己输入数据，如图 5.1 所示。



	1	2	3	4	5
1	1	2	3	4	5
2	2	4	6	8	10
3	3	6	9	12	15
4	4	8	12	16	20
5	5	10	15	20	25
6	6	12	18	24	30
7	7	14	21	28	35
8	8	16	24	32	40
9	9	18	27	36	45
10	10	20	30	40	50
11	11	22	33	44	55
12	12	24	36	48	60

图 5.1 一个简单的矩阵窗口

5.1.2 Set Properties 属性

通过 Matrix → Set Properties 命令可以设置 Matrix 的格式。如 Cell Width (列宽), Internal

(数据类型), Data Format (数据格式), Numeric Display (数字的有效位数或小数点的显示格式)。Display 和 Digits 的设置参考第 2 章 Worksheet 部分, Data Type 主要是设置数据类型, 如果数据是整数可设为 Long, 如果数据有小数部分, 可设为 Real, 如果数据绝对值很大, 则设为 Double, 如图 5.2 所示。



图 5.2 设置矩阵窗口属性

5.1.3 Set Dimensions 规格

通过 Matrix → Set Dimensions 命令可以设置 Matrix 的大小。其中 Dimensions 标签可以设置 Matrix 大小, Coordinates 标签可以设置匹配的区域, 如图 5.3 所示。

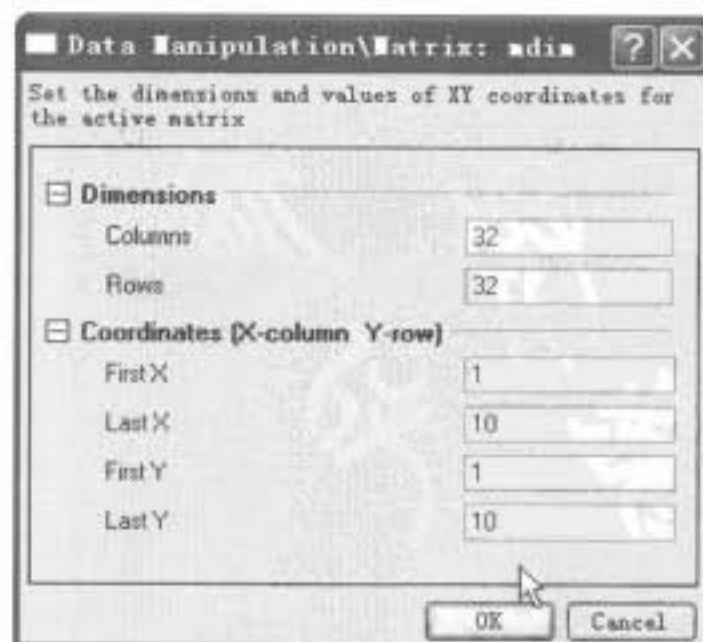


图 5.3 设置矩阵窗口维度

5.1.4 Set Values 设值

可以通过 Matrix → Set Values 命令来填充 Matrix 的数据。x 代表在 x 轴上的比例, y 代表

在 y 轴上的比例, 由 1 至 10 分布。i 代表行号, j 代表列号。

我们先通过上面几小点的操作得到一个 4×4 , 列宽为 10 的 Matrix, 在 Set Values 对话框的输入框中填入“abs(i-j)*i”, 单击 OK 按钮, 得到如图 5.4 的 Matrix。

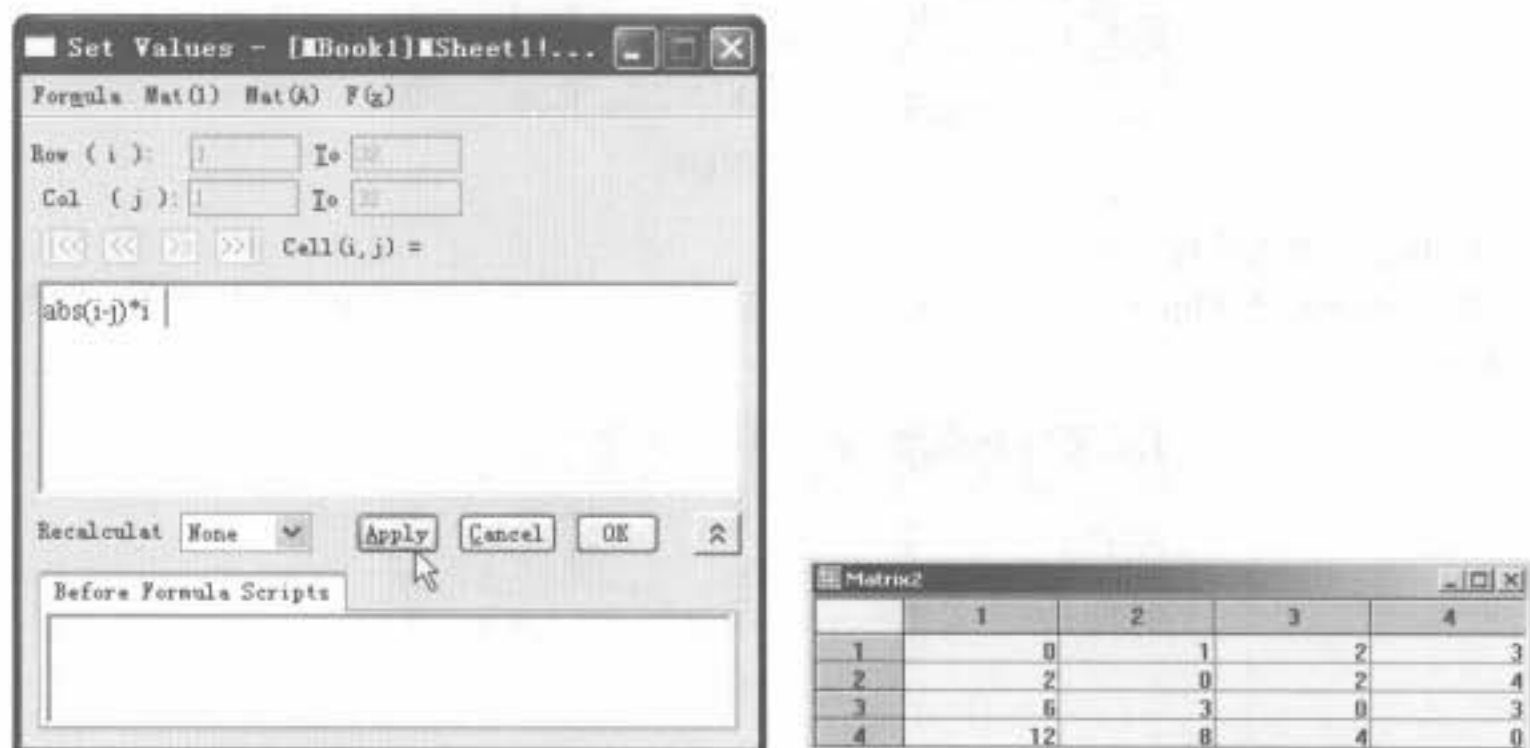


图 5.4 通过公式填充数据

5.1.5 Matrix 窗口常用操作

1. Transpose 转置

通过 Matrix \rightarrow Transpose 命令可以对 Matrix 转置, 即纵横数值反转。对图 5.4 的数据转置得到如图 5.5 的 Matrix。

	1	2	3	4
1	0	2	6	12
2	1	0	3	8
3	2	2	0	4
4	3	4	3	0

图 5.5 数据转置

2. Invert 颠倒

通过 Matrix \rightarrow Invert 命令可以得到颠倒的 Matrix。对图 5.4 的数据操作后得到如图 5.6 的 Matrix。

	1	2	3	4
1	-0.33333	0.25	0	0.04167
2	0.5	-0.5	0.16667	0
3	0	0.25	-0.33333	0.125
4	0.16667	0	0.16667	-0.08333

图 5.6 数据颠倒

3. Rotate 90° 旋转

通过 Matrix \rightarrow Rotate 90° 命令可以将 Matrix 顺时针旋转 90°。对图 5.4 的数据操作后得

到如图 5.7 的 Matrix。

	1	2	3	4
1	12	6	2	0
2	8	3	0	1
3	4	0	2	2
4	0	3	4	3

图 5.7 数据旋转

4. Flip V 垂直反转

通过 Matrix → Flip V 命令可以将 Matrix 垂直反转。对图 5.4 的数据操作后得到如图 5.8 的 Matrix。

	1	2	3	4
1	12	8	4	0
2	6	3	0	3
3	2	0	2	4
4	0	1	2	3

图 5.8 垂直反转

5. Flip H 水平反转

通过 Matrix → Flip H 命令可以将 Matrix 水平反转。对图 5.4 的数据操作后得到如图 5.9 的 Matrix。

	1	2	3	4
1	3	2	1	0
2	4	2	0	2
3	3	0	3	6
4	0	4	8	12

图 5.9 水平反转

6. Expand 扩展

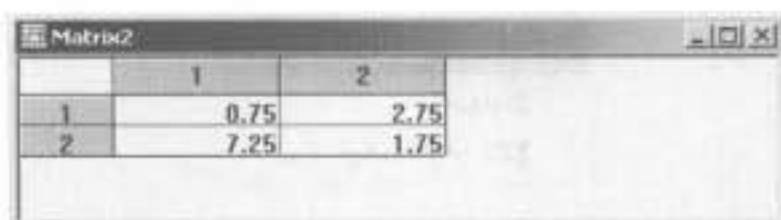
通过 Matrix → Expand 命令可以将 Matrix 扩展。对图 5.4 的数据作 Rows 的 2 倍扩展，Columns 的 1 倍扩展得到如图 5.10 所示的 4×8 的 Matrix。

	1	2	3	4
1	0	1	2	3
2	0.61224	0.08163	2.2449	3.67347
3	1.59184	-0.10204	2.12245	3.97959
4	2.93878	0.44898	1.63265	3.91837
5	4.65306	1.93878	-0.04082	3.4898
6	6.73469	3.59184	0.20408	2.69388
7	9.18367	5.61224	1.55102	1.53061
8	12	8	4	0

图 5.10 扩展矩阵数据

7. Shrink 收缩

通过 Matrix → Shrink 命令可以将 Matrix 收缩。对图 5.4 的数据作 Rows 的 2 倍收缩，Columns 的 2 倍收缩得到如图 5.11 所示的 2×2 的 Matrix。



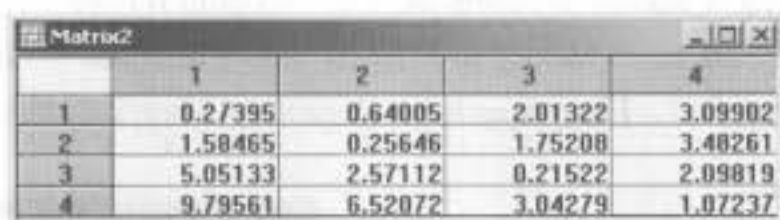
	1	2
1	0.75	2.75
2	7.25	1.75

图 5.11 压缩数据

如何理解收缩呢？你可以把整个 Matrix 看作是一个位图，把每一个单元格看作是一个像素。收缩时像素是减少了，但是它的整体还是那个位图，只不过尺寸变小了。扩展也是一样的原理。

8. Smooth 平滑

通过 Matrix → Smooth 命令可以将 Matrix 数据平滑（通俗地讲是把相邻数据的差缩小）。对图 5.4 的数据作数据平滑操作得到如图 5.12 所示的 Matrix。



	1	2	3	4
1	0.27395	0.64005	2.01322	3.09902
2	1.58465	0.25646	1.75208	3.48261
3	5.05133	2.57112	0.21522	2.09819
4	9.79561	6.52072	3.04279	1.07237

图 5.12 数据平滑

9. Integrate 积分

通过 Matrix → Integrate 命令可以对 Matrix 求积分，对图 5.4 的数据求积分得到如图 5.13 所示的结果。

图 5.13 Matrix 积分的结果

上面的 Matrix 操作都是可逆的，但是由于该数据 Matrix 的规模限制，所以在数据精度方面会有损失，例如 Shrink 的精度就损失得很厉害。

以上是关于 Matrix 的建立和常用操作。不过如果原来就已经具备 XYZ 三维数据，则可以直接导入 Worksheets，然后通过 Edit → Convert to Matrix 命令把 Worksheet 转换成 Matrix（下节介绍），或是通过 File → Import 命令导入 Matrix。当然，你也可以通过 Matrix 活动中的 Edit → Convert to Worksheet 命令把 Matrix 做成 Worksheet。Matrix 数据与 Worksheet 数据之间的转换，对作图来说，是很重要的操作。

5.2 三维数据转换

要将 Worksheet 中的数据转换为 Matrix，主要有 3 种算法：Direct、Expand 和 XYZ Gridding。在激活 Worksheet 窗口的情况下，通过 Worksheet → Convert to Matrix 菜单中的命令可以打开对话框，对数据进行转换，如图 5.14 所示。

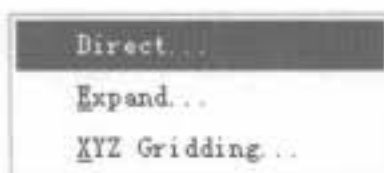


图 5.14 将 Worksheet 转换成 Matrix 的三种算法

5.2.1 将 Worksheet 转换为 Matrix (Direct 方法)

通过 Worksheet → Convert to Matrix → Direct 命令可以打开 Data Manipulation\Gridding 对话框。打开 Data Manipulation\Gridding 对话框之后，里面除了输入输出设置项之外，主要有 Trim Missing (是否整行/整列删除缺失数据的行/列) 和 Data Format 选项，可以设置为 No X and Y (转换整个 Worksheet)、X across columns (将第一列作为 Matrix 的 Y 轴显示) 或 Y across columns (将第一行作为 Matrix 的 X 轴显示)，如图 5.15 所示。

当 Data Format 选项为 X across columns 或 Y across columns 时，还有以下选项：X Values in/Y Values in (选择数据来源)、Y Values in First Column/X Values in First Column (是否把第一列的值设置到 X、Y 轴上面)、Even Spacing Tolerance (Matrix 的轴的刻度容差)，如图 5.16 所示。

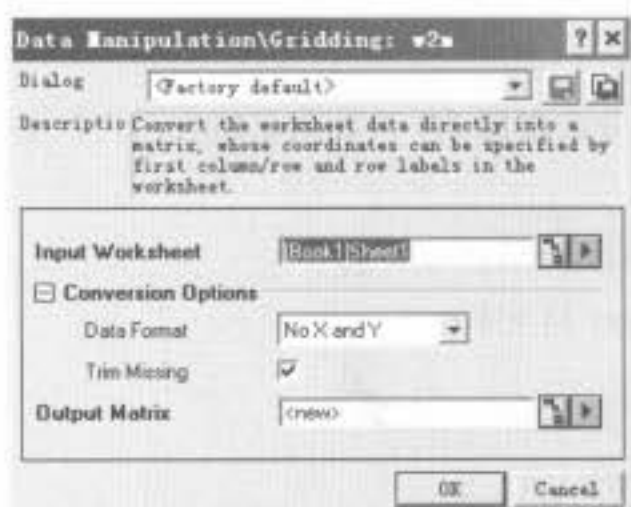


图 5.15 Manipulation\Gridding 对话框：Direct 方法

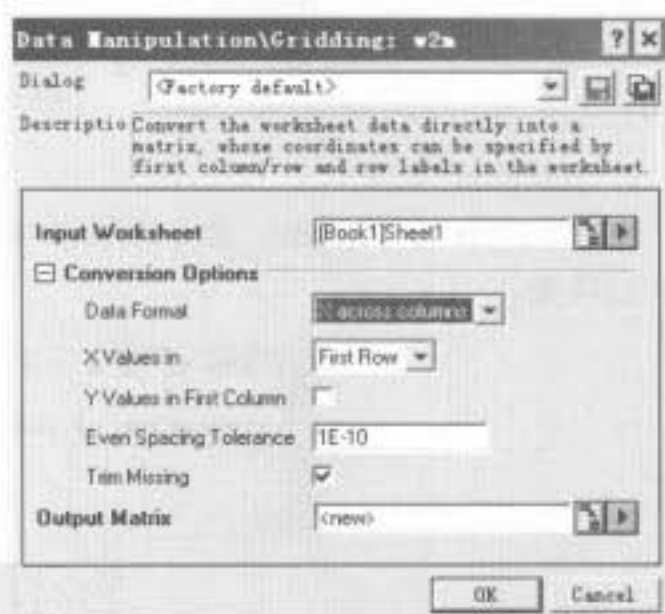


图 5.16 Manipulation\Gridding 对话框参数设置

设置完毕后单击 OK 按钮完成转换，如图 5.17 所示。



图 5.17 将 Worksheet 转换成 Matrix 的结果

5.2.2 扩展 Matrix (Expand 方法)

通过 Worksheet → Convert to Matrix → Expand 命令可以打开 Data Manipulation\Gridding 对话框对 Worksheet 进行扩展转换。在这个对话框中，可以设置 Expand for Every Row/Col (只

接受整数, 扩展的倍数) 和 Orientation (扩展方向), 如图 5.18 所示。

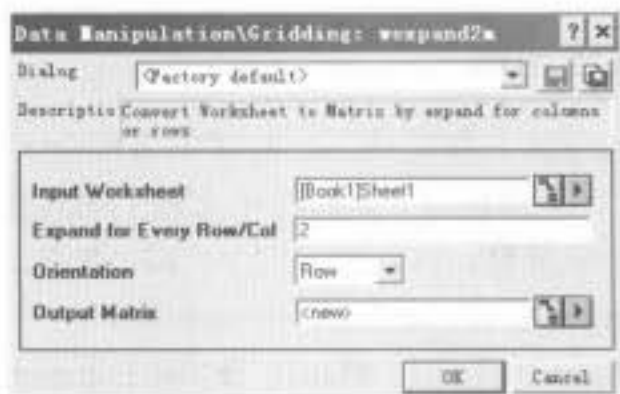


图 5.18 Manipulation\Gridding 对话框: Expand 方法

单击 OK 按钮可以完成转换, 如图 5.19 所示。



图 5.19 转换结果

5.2.3 XYZ Gridding (网格化)

XYZ Gridding 的过程如图 5.20~图 5.22 所示。

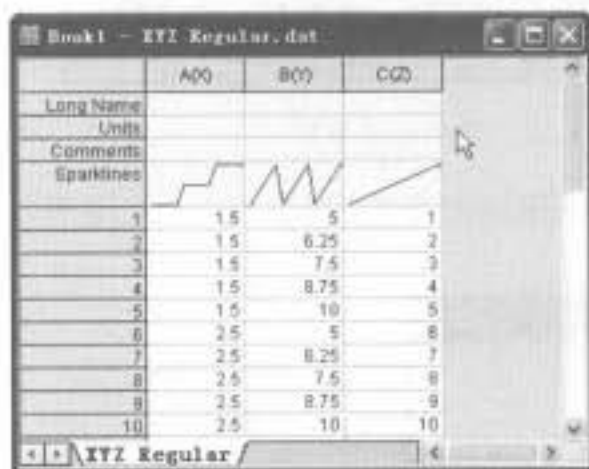


图 5.20 要转换的原数据表

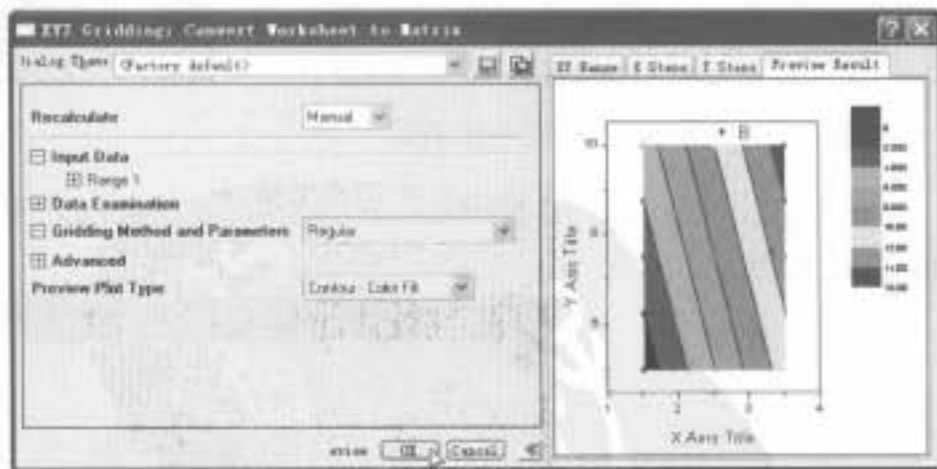


图 5.21 XYZ Gridding 方法

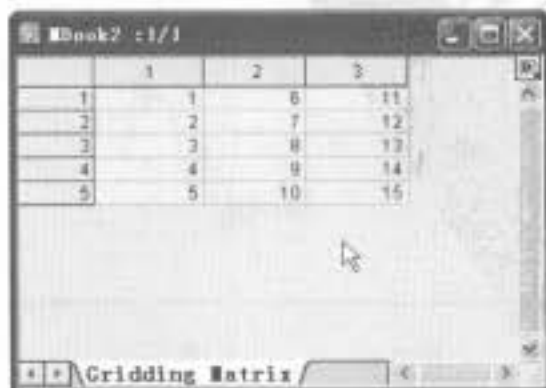


图 5.22 转换结果

5.3 三维作图

5.3.1 从矩阵窗口建立三维图形

本节数据将以我们熟悉的球体方程得到。已知球的方程为 $x^2+y^2+z^2=r^2$ ，把它变换一下，取正值，得到 $z=(r^2-x^2-y^2)^{1/2}$ 。上面说过， x 代表在 x 轴上的比例， y 代表在 y 轴上的比例，由 1~10 分布。为了让图形适应屏幕，因此设半径 $r=10$ ，并把 x, y 代入方程中的 x, y 得到公式 $z=(100-x^2-y^2)^{1/2}$ ，在 Origin 中可以表示为 $z=\text{sqrt}(100-x^2-y^2)$ 。

先新建一个 32×32 的 Matrix，先通过 Matrix → Set Dimensions 命令将 X 轴和 Y 轴的范围设置为 -10~10。

然后通过 Matrix → Set Values 命令的输入框填入上面的公式 $\text{sqrt}(100-x^2-y^2)$ ，单击 OK 按钮即得到一个 Matrix。由于我们已经限定了 Z 轴为正值，因此这个数据其实只是一个半球的数据，如图 5.23 和图 5.24 所示。



图 5.23 设置 X 和 Y 轴坐标范围

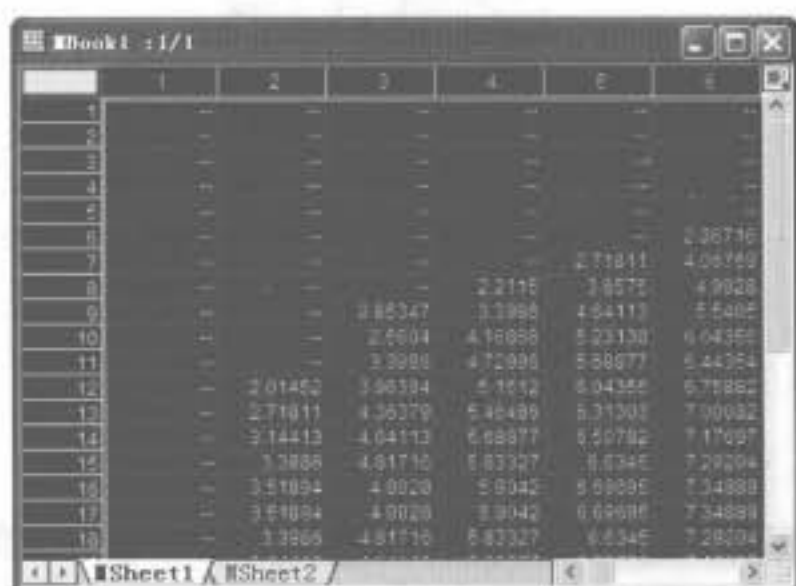


图 5.24 半个球型数据

然后通过 Plot → 3D Surface → Color Map Surface 菜单下面的命令便可以绘制三维图形，如图 5.25 所示。

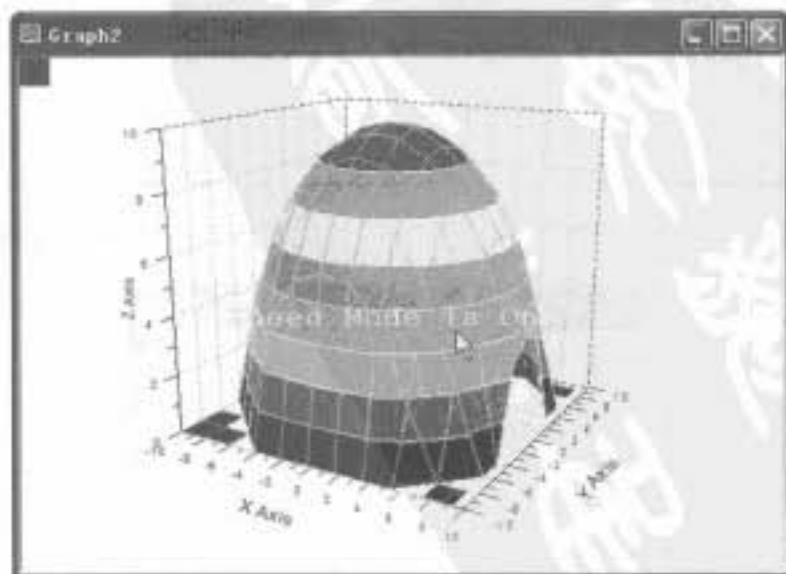


图 5.25 三维半球图形

上面的这个图形有一些缺点，包括两个方面，一是 X 轴为 Y 轴的范围都是 ± 10 ，而 Z 轴

只从 0~10, 因此半球出现了变形; 只是由于自动打开了速度模式, 因此图形过于粗略。通过 Graph 菜单中的 Speed Mode, 关闭速度模式可进一步得到更精细的图形。

然后用鼠标双击 Z 轴坐标, 调节 Z 轴的坐标刻度为-10~10, 则可以得到一个较清楚的半球, 如图 5.26~图 5.28 所示。

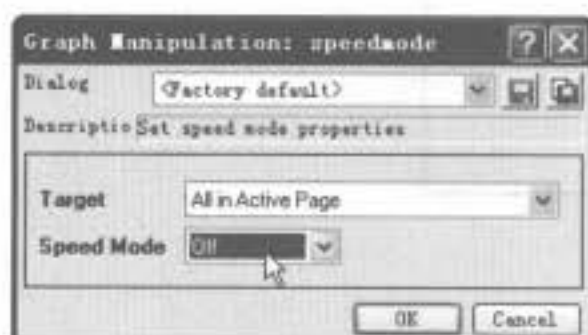


图 5.26 关闭速度模式

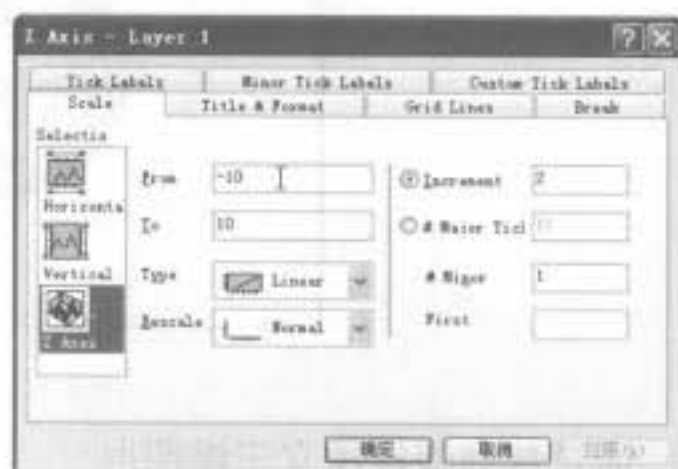


图 5.27 调整 Z 轴刻度

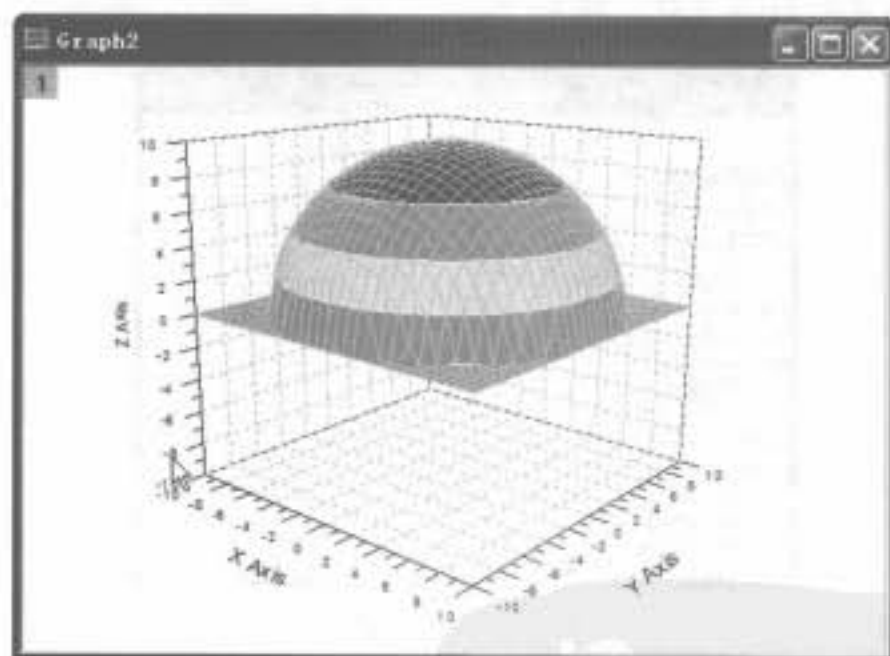


图 5.28 得到半球

在矩阵窗口添加一个 Matrix 表 (MSheet2), 其他设置与前面相同, 但是 Set Values 时公式换成 $-\sqrt{100-x^2-y^2}$, 以便得到另一个半球的数据。然后在 Graph 图形窗口单击第 1 层的层图标, 打开 Layer Content 对话框, 添加第二个表, 如图 5.29 所示。

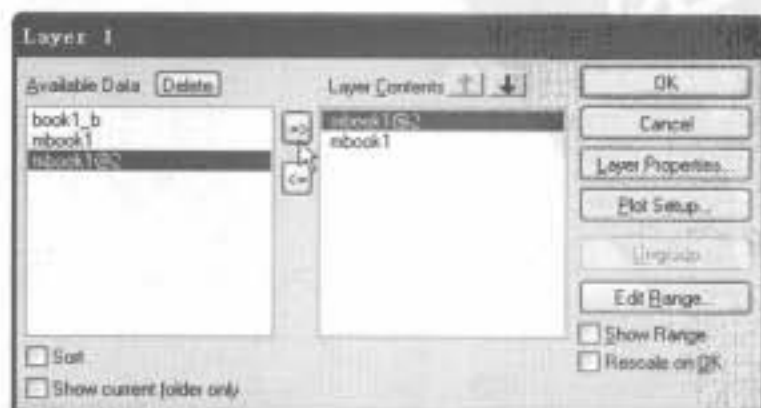


图 5.29 三维图形的层内容管理

最后作图得到一个球体，如图 5.30 所示。

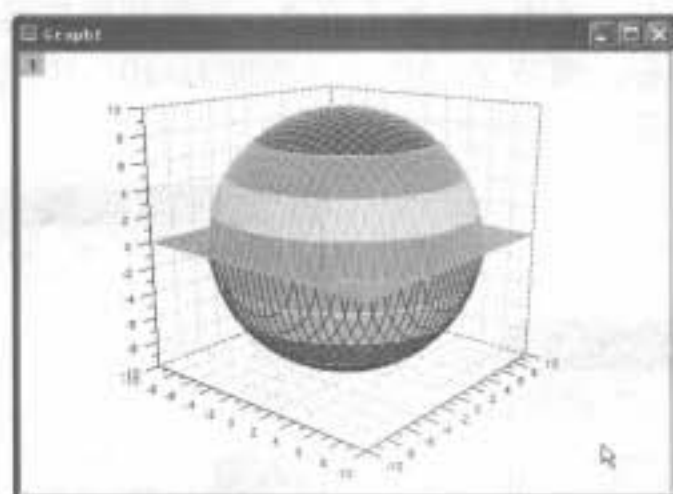


图 5.30 最终图形

5.3.2 通过数据转换建立三维图形

首先导入 C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Matrix Conversion and Gridding\XYZ Random Gaussian.dat 数据文件，得到 WorkSheet 窗口数据，如图 5.31 所示。



图 5.31 原数据

将第三列设为 Z 轴，然后选择 Worksheet → Convert to Matrix → XYZ Gridding 将数据网络化，得到矩阵窗口，如图 5.32 所示。

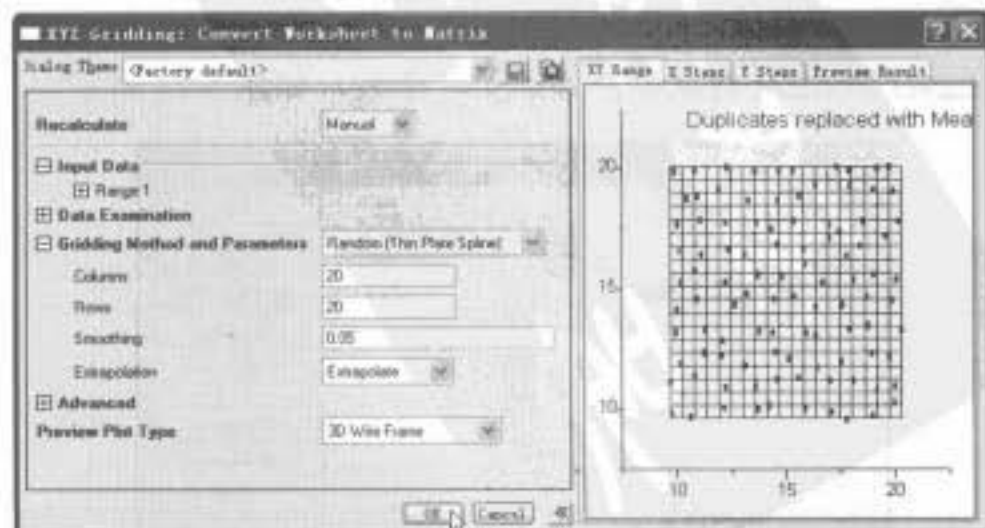
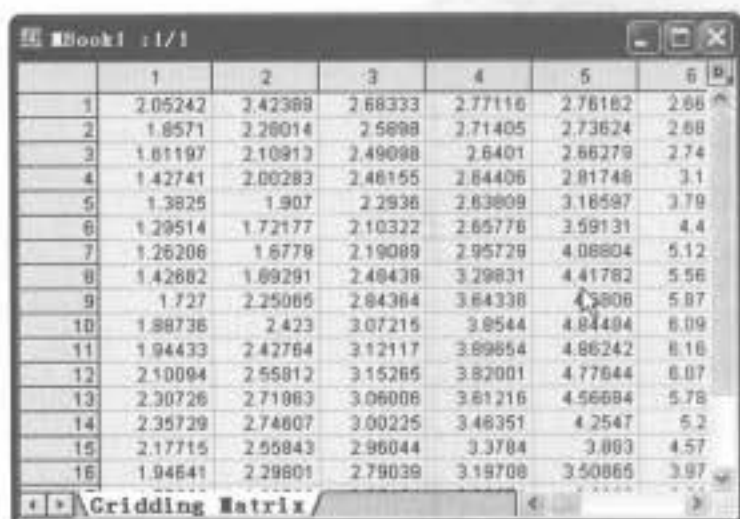


图 5.32 三维数据转换

选择 Plot → 3D Wires and Bars → Wire Frame 菜单命令得到三维线框图, 如图 5.33 和图 5.34 所示。



	1	2	3	4	5	6
1	2.05242	2.42389	2.68333	2.77116	2.76182	2.66
2	1.8571	2.28014	2.5898	2.71405	2.73624	2.68
3	1.81197	2.10913	2.49098	2.6401	2.66279	2.74
4	1.42741	2.00283	2.48155	2.64406	2.81748	3.1
5	1.3825	1.907	2.2936	2.63809	3.18597	3.79
6	1.29514	1.72177	2.10322	2.65776	3.59131	4.4
7	1.26206	1.6779	2.19089	2.95729	4.08804	5.12
8	1.42882	1.89291	2.48438	3.29831	4.41782	5.56
9	1.727	2.25085	2.84384	3.64338	4.5808	5.87
10	1.88736	2.423	3.07215	3.8544	4.84494	6.09
11	1.94433	2.42784	3.12117	3.89854	4.86242	6.16
12	2.10094	2.55812	3.15265	3.82001	4.77644	6.07
13	2.30726	2.71863	3.06006	3.61216	4.56684	5.78
14	2.35729	2.74607	3.00225	3.48351	4.2547	5.2
15	2.17715	2.55843	2.96044	3.3784	3.883	4.57
16	1.94641	2.29801	2.79039	3.19708	3.50865	3.97

图 5.33 转换后的矩阵窗口

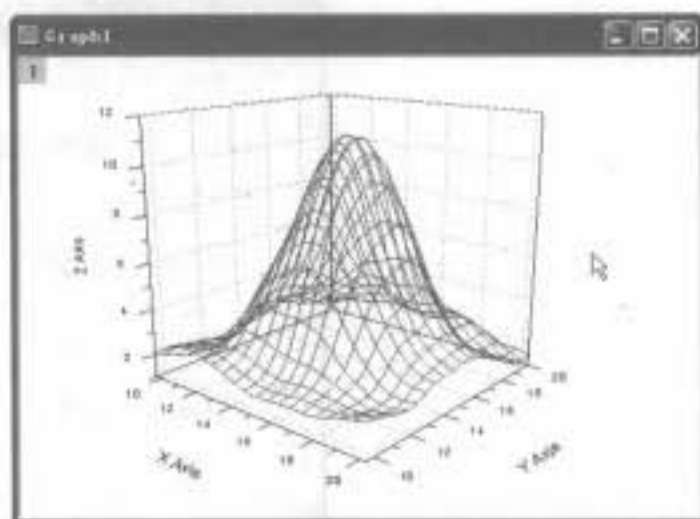


图 5.34 三维线框图

5.3.3 三维图形设置

三维图形参数的设置, 从结构上与二维图形并没有不同, 方法是使用鼠标右键单击图层, 然后选择相应的菜单, 如图 5.35 所示



图 5.35 图形设置

但由于是三维图形, 因此参数方面必然存在一定的差异, 单击 Layer Properties 进入层属性对话框, 主要是设置一些显示的参数。

用鼠标双击三维图形的坐标轴, 可进入坐标轴设置, 本部分与二维图形基本相同, 不同的地方是多了第三维的坐标轴, 如图 5.36 和图 5.37 所示。



图 5.36 图形参数设置对话框

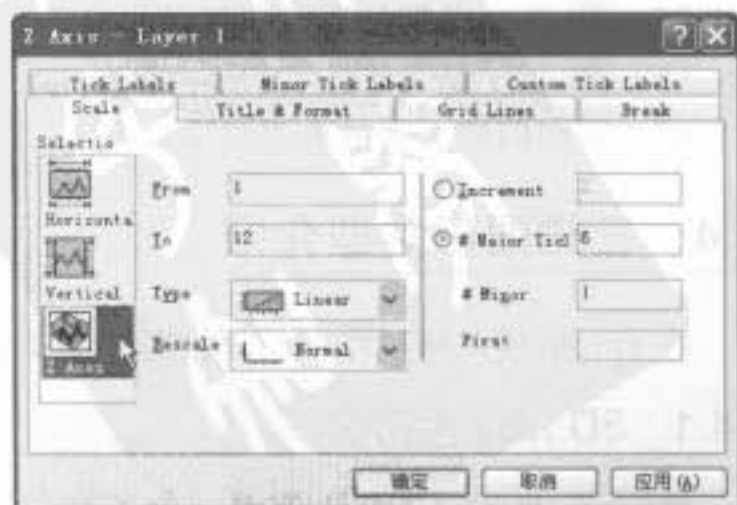


图 5.37 坐标轴设置

用鼠标双击线框，可进入图形细节设置，不同的三维图形，设置的参数略有不同，如图 5.38 所示。

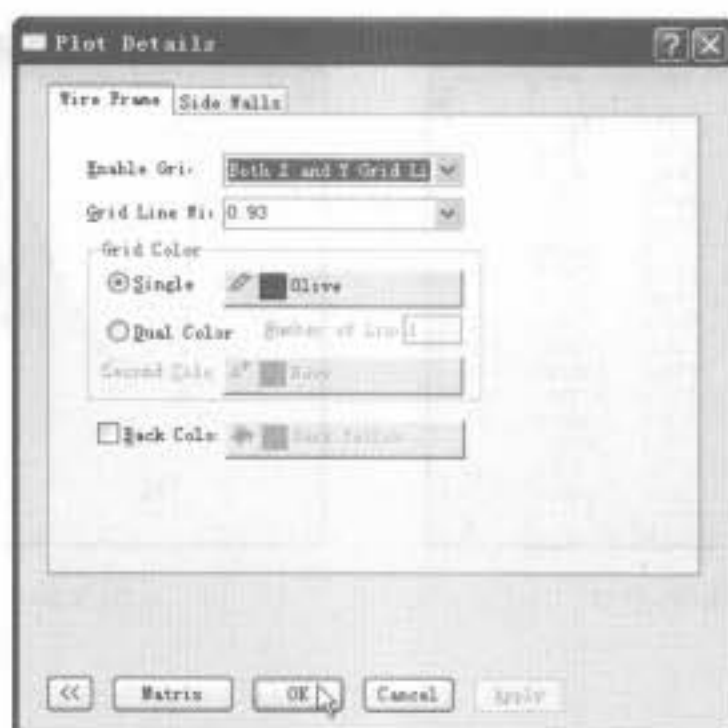


图 5.38 图形细节设置

5.3.4 三维图形旋转

在 3D Graph 活动中，工具栏中会出现一系列与旋转相关的按钮，如果见不到这列按钮可以通过 View → ToolBars → 3D Rotation 命令把它们拖出来，单击它们即可旋转图形，如图 5.39 所示。



图 5.39 三维旋转工具栏

其中：

- (1) 表示将图形绕画布的 Y 轴旋转。
- (2) 表示将图形逆时针或顺时针旋转。
- (3) 表示将图形绕画布的 X 轴旋转。
- (4) 表示改变坐标轴之间的角度。
- (5) 表示把图形适应窗口显示。
- (6) 表示恢复坐标轴角度为默认。
- (7) 后面的数字表示每次旋转的角度。

5.4 三维图形类型介绍

在 Origin 中，可以绘制的三维图形主要包括以下这些。

5.4.1 3D XYY Graph

绘制这 3D XYY Graph 需要一个 X 列和多个 Y 列。

- (1) 3D Waterfall: 3D 瀑布图，如图 5.40 所示。

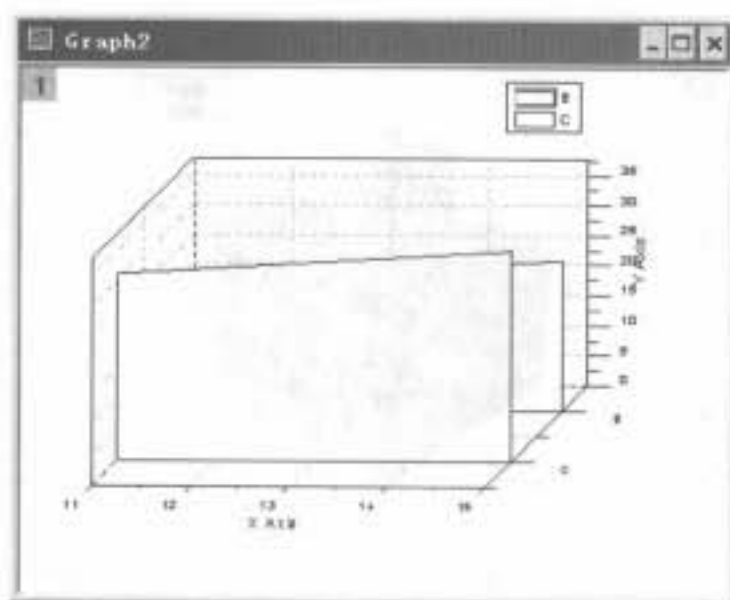


图 5.40 3D XYZ Graph

(2) 3D Walls, 如图 5.41 所示。

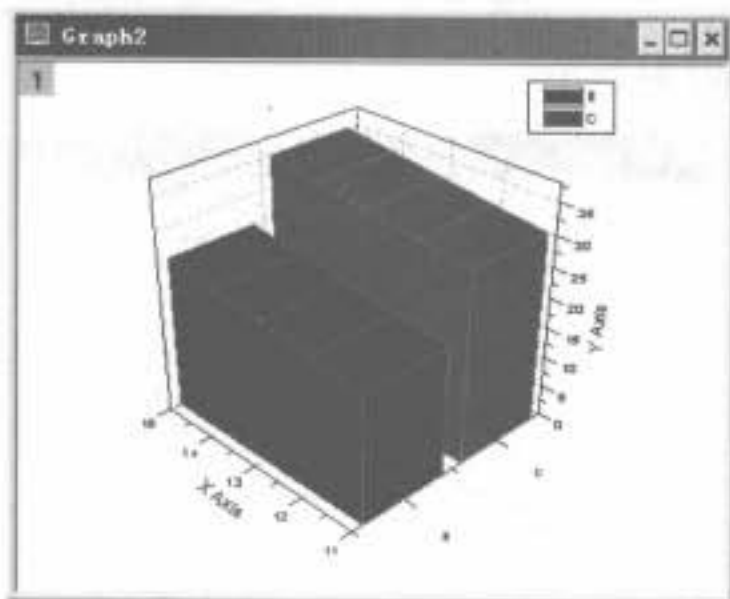


图 5.41 3D Walls

(3) 3D Ribbons, 如图 5.42 所示。

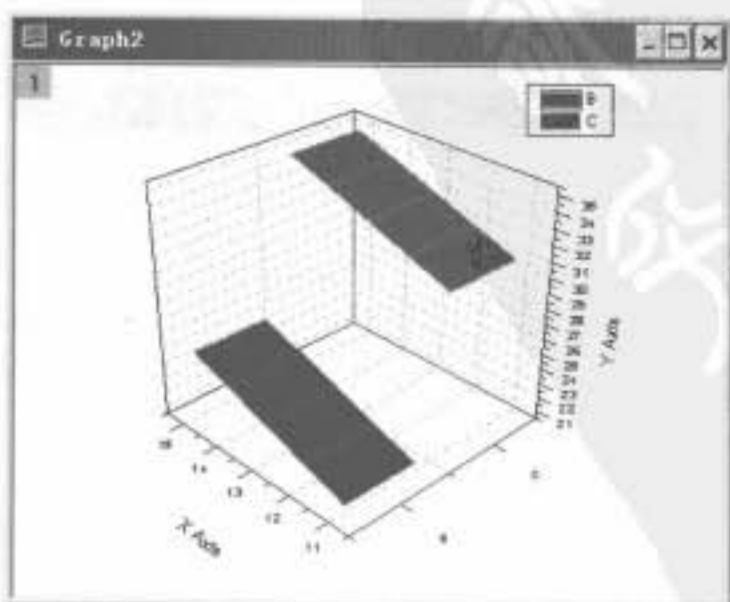


图 5.42 3D Ribbons

(4) 3D Bars, 如图 5.43 所示。

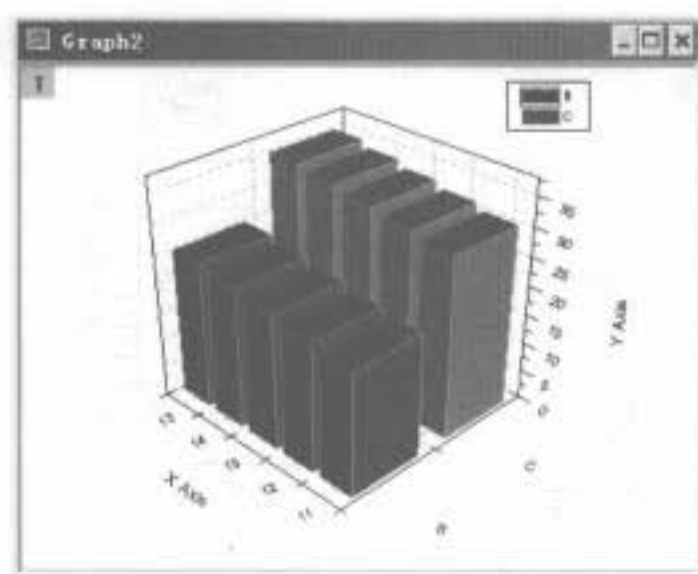


图 5.43 3D Bars

5.4.2 3D XYZ Graph

3D XYZ Graph 需要 X、Y、Z 列各一个，用于在三维空间中表示三维图形。

(1) 3D Scatter，如图 5.44 所示。

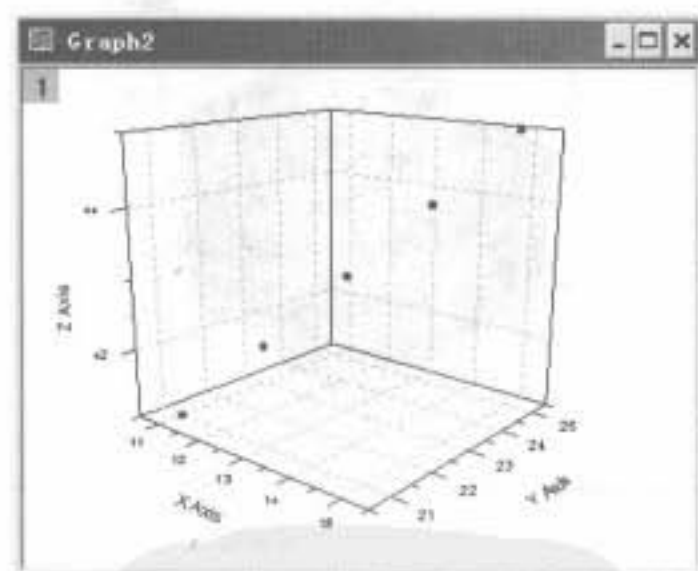


图 5.44 3D Scatter

(2) Trajectory，如图 5.45 所示。

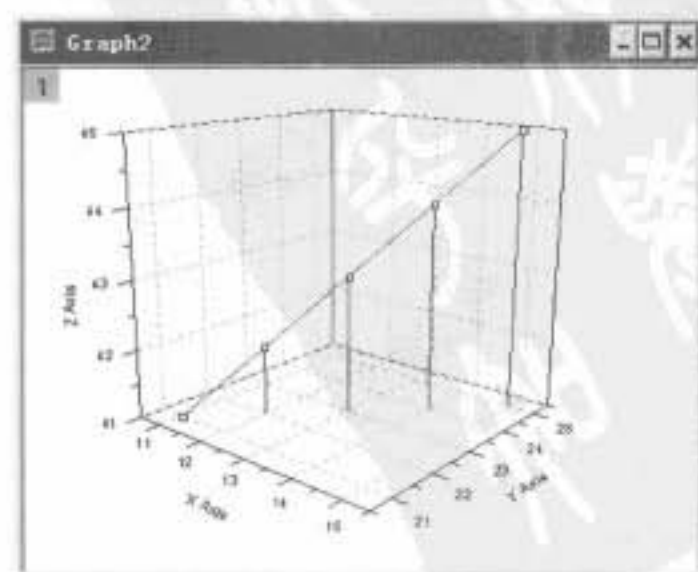


图 5.45 Trajectory

5.4.3 等高线图

这一类图形用于以等高线的方式显示数据。

(1) B/W Lines + Labels: 黑白等高线图, 如图 5.46 所示。

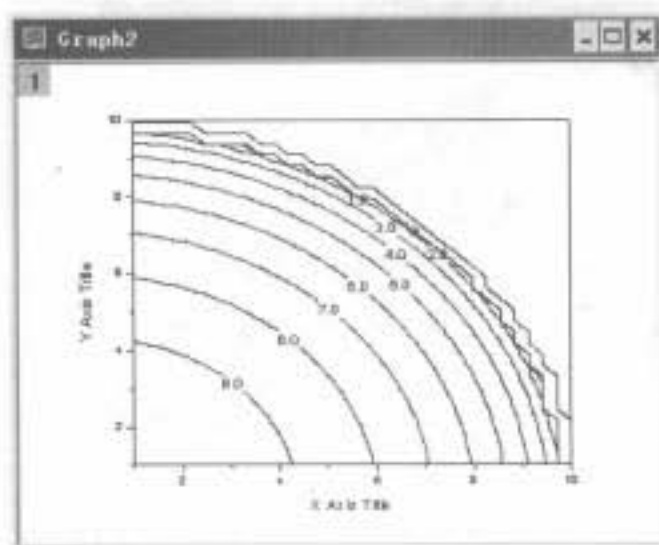


图 5.46 B/W Lines

(2) Color Fill: 彩色等高线图, 如图 5.47 所示。

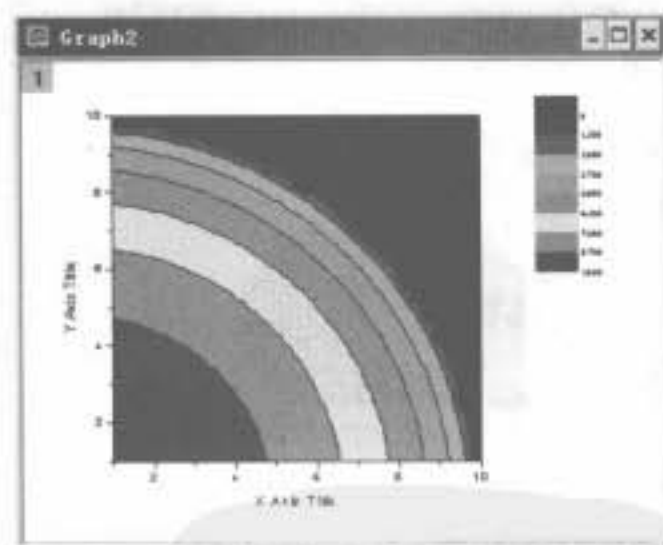


图 5.47 Color Fill

(3) Gray Scale Map: 灰度等高图, 如图 5.48 所示。

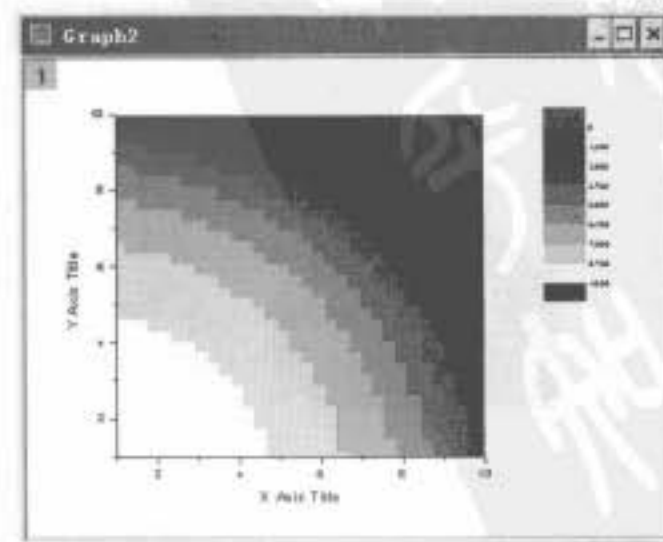


图 5.48 Gray Scale Map

5.4.4 3D Surface

3D Surface 图形用于绘制三维曲面图形。

(1) Color fill Surface, 如图 5.49 所示。

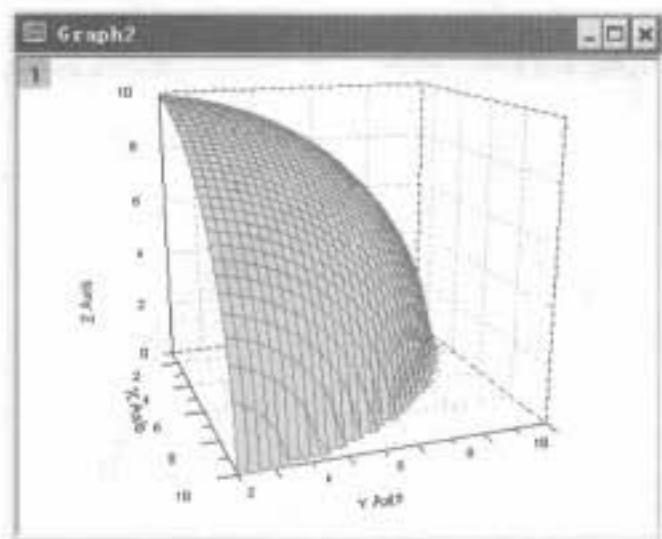


图 5.49 3D Surface

(2) X Constant with Base, 如图 5.50 所示。

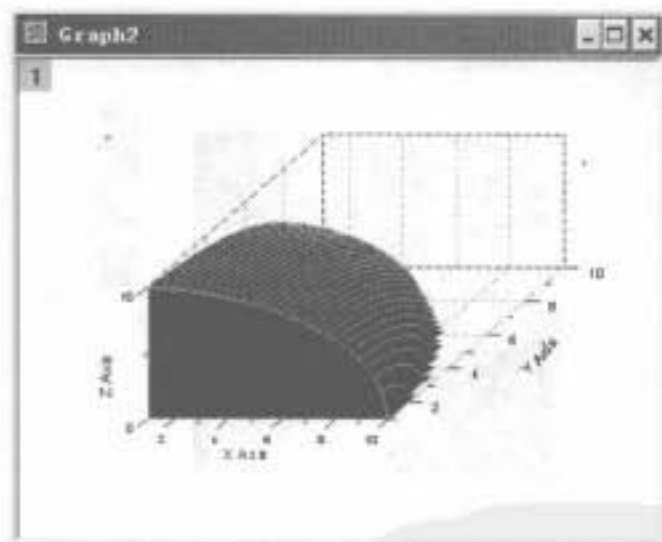


图 5.50 X Constant with Base

(3) Y Constant with Base, 如图 5.51 所示。

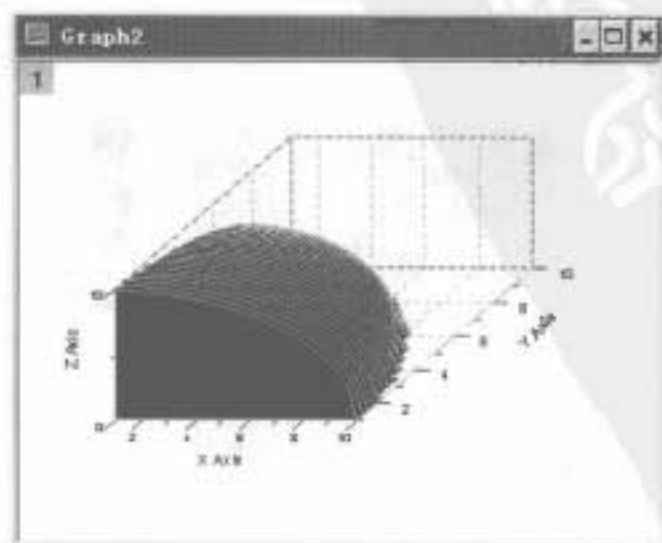


图 5.51 Y Constant with Base

(4) Color Map Surface, 如图 5.52 所示。

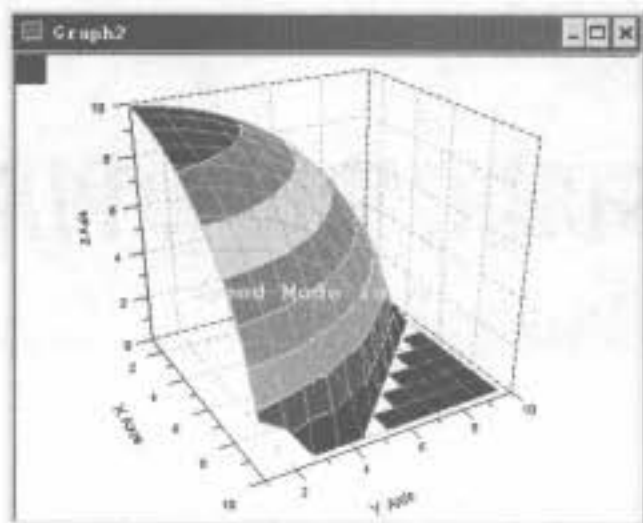


图 5.52 Color Map Surface

5.4.5 Image

以下 2 种类型以图像的方式来显示数据。

(1) Image Plot: 以黑白图形表示数据, 如图 5.53 所示。

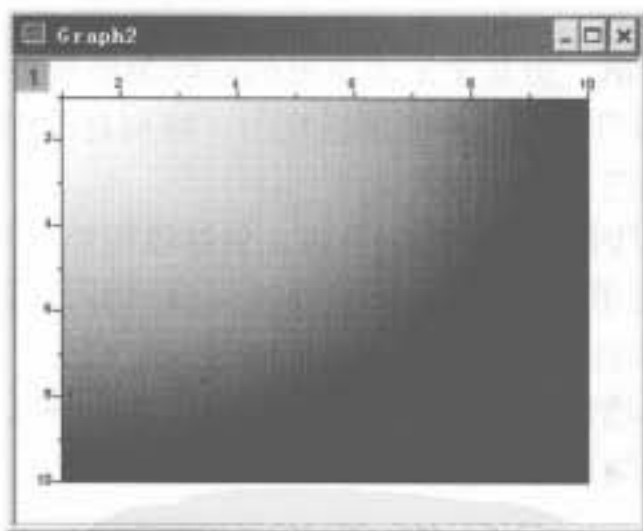


图 5.53 Image Plot

(2) Profiles: 可以从侧面剖析图形, 可以在画布内选择 Crossed Line (交叉线) 和 Arbitrary Line (任意直线), 如图 5.54 所示。

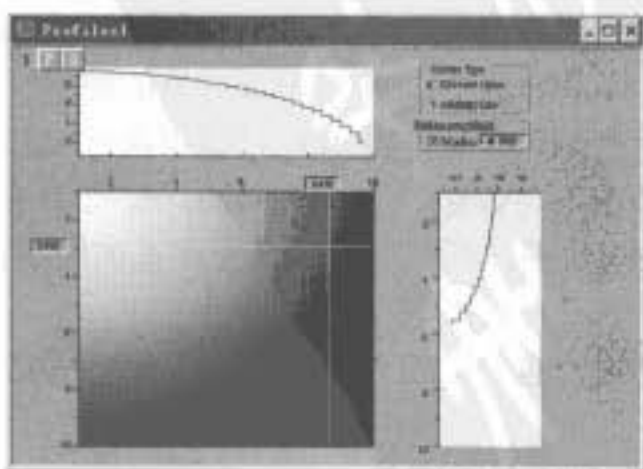


图 5.54 Profiles

本章要点

- 软件共享
- Layout 窗口
- 图形输出
- 论文出版
- 图形打印

图形的输出看起来很简单，但其实是最重要的，因为不管多么复杂多么重要的图形，如果一直存放在 Origin 工程项目中，而不能输出利用，特别是输出到要表达图形的文档之中，并加以说明或讨论，那么其意义显然不大。

Origin 中图形的输出，具有四个不同的意思，包括以图形对象 (Object) 的形式输出到其他软件如 Word 中共享、以图形文件包括 (矢量图或位图) 的形式输出以便插入到文档中使用、以 Layout 页面的形式输出和打印输出。

说到利用，就不是直接输出那么简单，因为要脱离 Origin，与目标文档混合排版，因此要考虑到目标文档和出版的情况加以调整。

6.1 与其他软件共享

Origin 软件使用了 Windows 平台中常用的对象共享技术，称为 OLE (Object Linking and Embedding, 对象连接与嵌入)。利用这个技术，可以将 Origin 图形对象连接或嵌入到任何支持 OLE 技术的软件中，典型的软件包括 Word、Excel 或 PowerPoint 等。

这种共享的方式仍然保持了 Origin 软件对图形对象的控制，在这些软件中只要双击图形对象，就可以打开 Origin 进行编辑，编辑修改后只要再执行更新命令，文档中的图形也会同步更新，此外由于 Origin 的图形与数据是一一对应的，拥有图形对象也就拥有原始数据，保存文档的同时会自动保存这些数据，不用担心图形文件丢失问题，这些都是 OLE 技术的灵活之处。

OLE 最大的缺点，就是用户自己的计算机上必须安装 Origin 软件，而且版本必须相同，否则就无法编辑。

以下以 Word 为例介绍这种输出方式。

6.1.1 通过剪贴板利用数据

最简单的就是使用剪贴板进行数据交换。可以选择需要输出的图形窗口选择 Edit → Copy Page 命令，复制整页，然后选择目标文档执行 Paste 粘贴命令即可，这其实是一种对象嵌入的快捷操作方式，如图 6.1 所示。

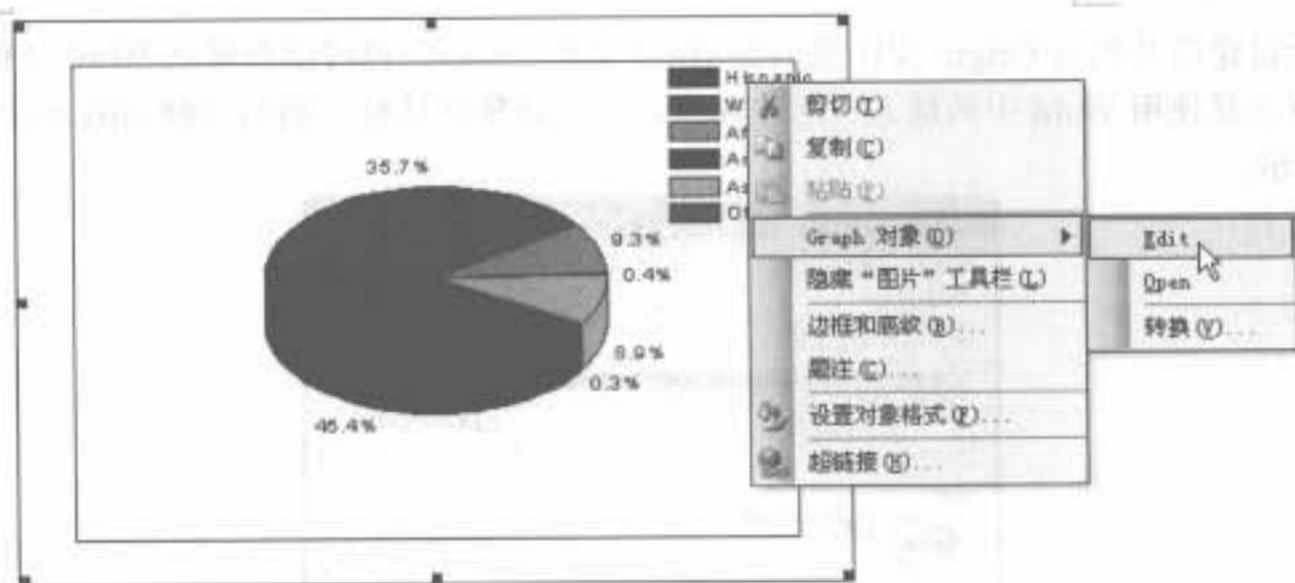


图 6.1 将 Origin 图形直接粘贴到 Word 文档

在 Word 文档中，用鼠标右键单击这个图形对象，即可打开右键快捷菜单，在菜单中可看到“Graph 对象”可以执行 Edit 编辑和 Open 打开这些操作，或者直接用鼠标双击这个图形，这些操作都会直接打开 Origin 进行编辑。

在 Origin 中编辑完成后要单击文件菜单的“更新 文档”命令，然后关闭 Origin 软件，在 Word 中将会得到更新后的图形，如图 6.2 所示。

如果留意，我们将会发现 Project Explorer 中只有图形窗口，而没有数据窗口，如果要得到图形的数据，则需要在 Origin 用鼠标右键单击图形，然后选择 Create worksheet 命令即可，如图 6.3 所示。

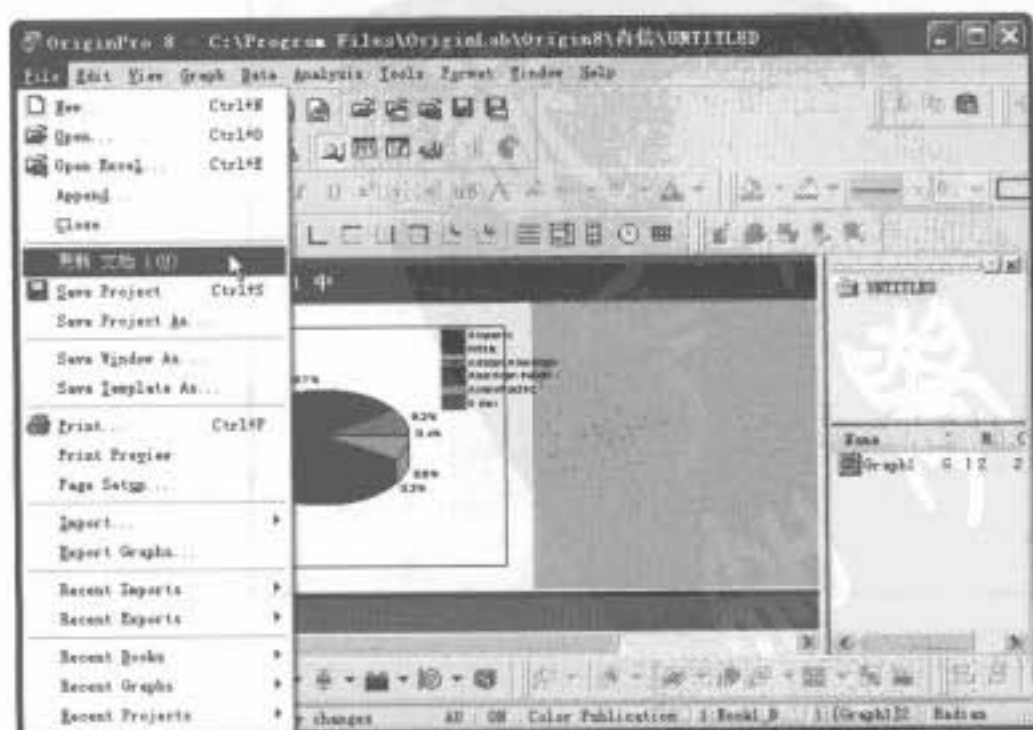


图 6.2 使用 Origin 软件编辑图形然后使用更新命令



图 6.3 利用图形建立数据表



Worksheet和Matrix类型的对象可以使用Copy命令复制到如.xls之类的数据表文件或.doc和.txt这样的文本文件中。但如果希望将Excel或文本文件的多列数据复制到Origin电子表格中,建议还是使用导入向导中的粘贴板导入功能,以避免数据错位。

6.1.2 创建并插入新的 Origin 图形对象

以上讨论的是先有 Origin 文件然后到 Word 文档,实际上也可以直接从 Word 文档中进行操作,方法是使用 Word 中的插入→对象命令,打开对象对话框,然后选择 Origin Graph,如图 6.4 所示。



图 6.4 Word 中插入对象对话框

这样会运行 Origin 并打开一个新的图形窗口,由于图形窗口中除默认坐标轴外什么也没有,因此要自己新建一个数据表 Worksheet,输入或到导入数据,然后使用图层命令 Layer Contents 对话框,自己添加数据到图层,与普通的 Origin 作图一般操作,最后单击文件菜单中的“更新 文档”命令,返回图形给 Word,如图 6.5 所示。

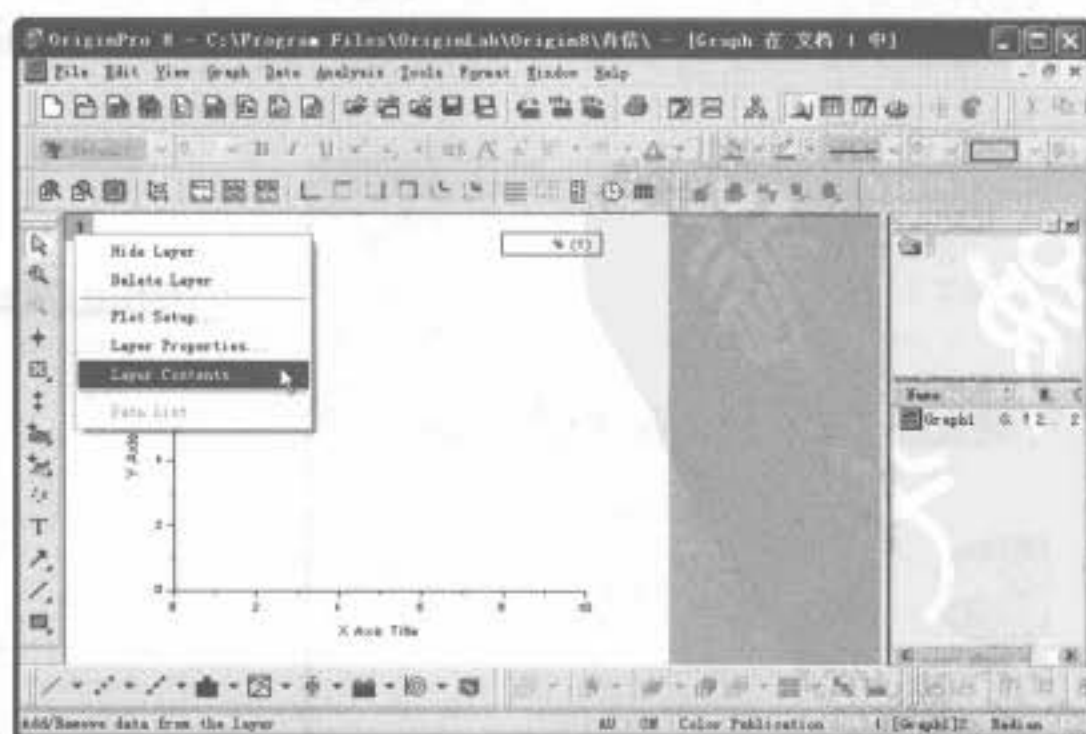


图 6.5 从一个窗口图形窗口建立图形

6.1.3 使用嵌入式图表

通过 Tools → Options 命令选项的 Graph 选项卡,给右下角的 Enable OLE In-place

Activation 选框打上勾。之后使用剪贴板把图像复制到如 Word 之类的软件中时图像会以控件的方式嵌入文档中, 这样你就可以直接在文档中编辑这个图像而不用打开 Origin 了, 如图 6.6 所示。

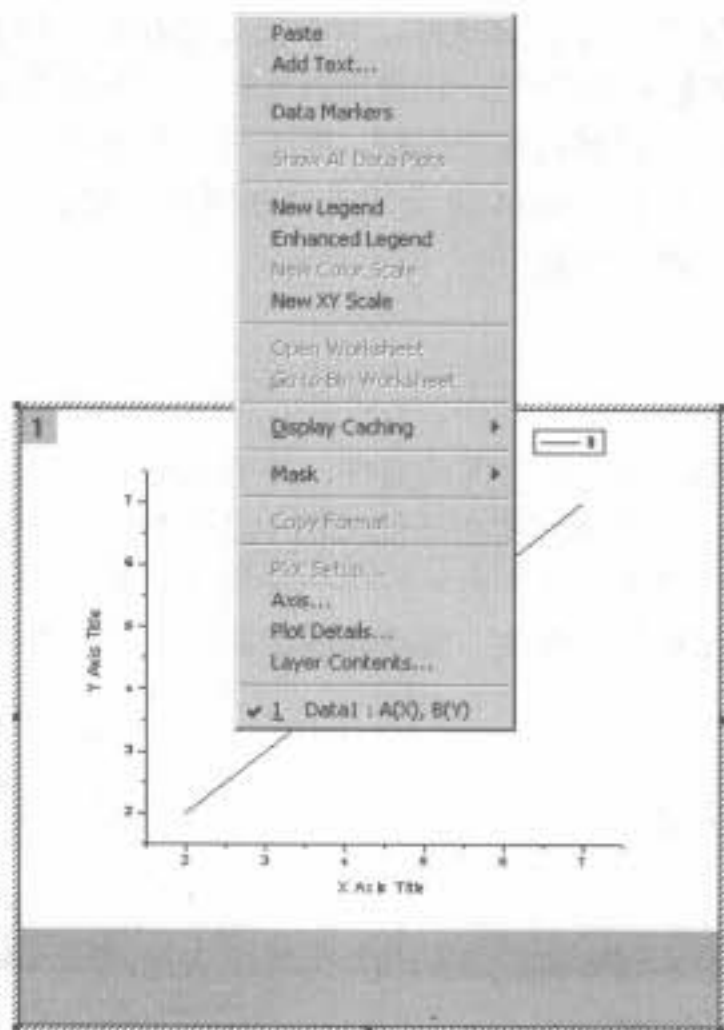


图 6.6 直接在 Word 文档中编辑 Origin 图形

6.1.4 使用链接式对象

链接式对象与嵌入式对象不同, 首先其数据是以独立文件的形式保存在 Word 文档以外的地方, 因此当这个文件被删除时 Word 文档将找不到源文件而不能显示图形; 其次在 Word 文档中看到的图形, 会根据图形文件的更新而更新, 即编辑图形只需直接硬盘中的编辑图形文件即可, 而无需打开 Word 文档, 如图 6.7 和图 6.8 所示。

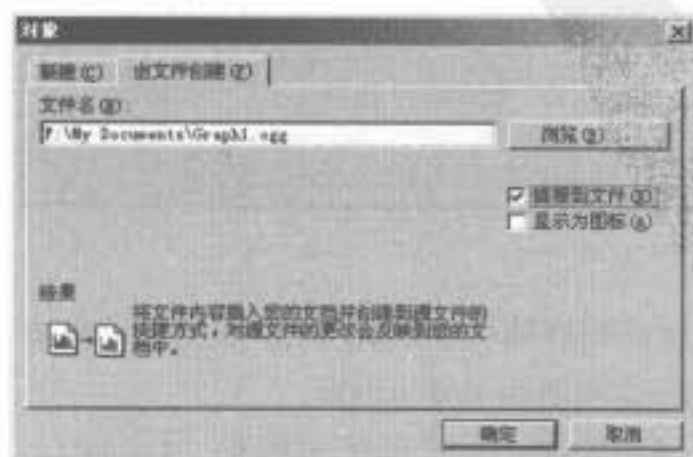


图 6.7 链接外部图形文件

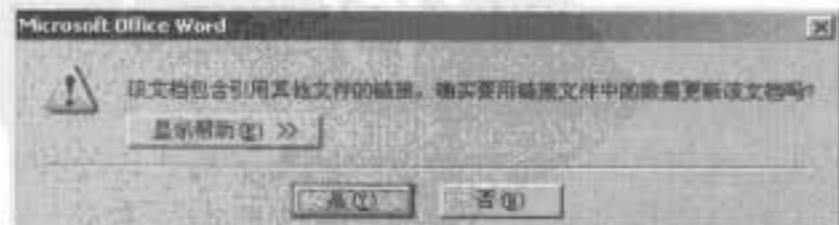


图 6.8 提示文件更新

先用 File → Save Window As 命令把图形保存为*.egg 格式文件。然后可以在 Word 中

选择插入→对象→由文件创建→浏览命令把这个*.ogg 以对象的形式插入,记得勾上链接到文件。之后你只要修改这个*.ogg 文件,Word 更新时,比如说重新打开这个文件时就会把新的数据应用到这个对象中去。

再次强调,由于 Origin 是一个英文软件,对中文处理存在一些 Bug,因此如果复制粘贴到 Word 中出现乱码(通常是出现??号),这是因为这些字符不是英文字符,在 Origin 中将字体改为中文字体,再粘贴就可以解决这个问题。至于另一个方法是通过下载一个专用的软件补丁解决中文兼容的问题。由于 OriginLab 公司已经在国内开设了子公司,相信未来的 Origin 版本能很好地处理中英文兼容的问题。

6.2 图形输出

我们认为,图形的输出,即输出为图形文件,是 Origin 图形利用的最有效途径。因为将图形保存为图形文件输出,一方面方便在其他文档中插入使用,更重要的是因图形文件是到处兼容的,从而避免了文档使用者(如论文投稿的杂志社)要安装 Origin 的问题。使用这个方法的缺点,是每当图形作了修改,要重新输出和插入,不能自动更新。

6.2.1 图形输出基础

无论是图形窗口还是 Layout 窗口,都可以使用文件菜单中的 Export Page 将窗口输出为图形文件,如图 6.9 所示。

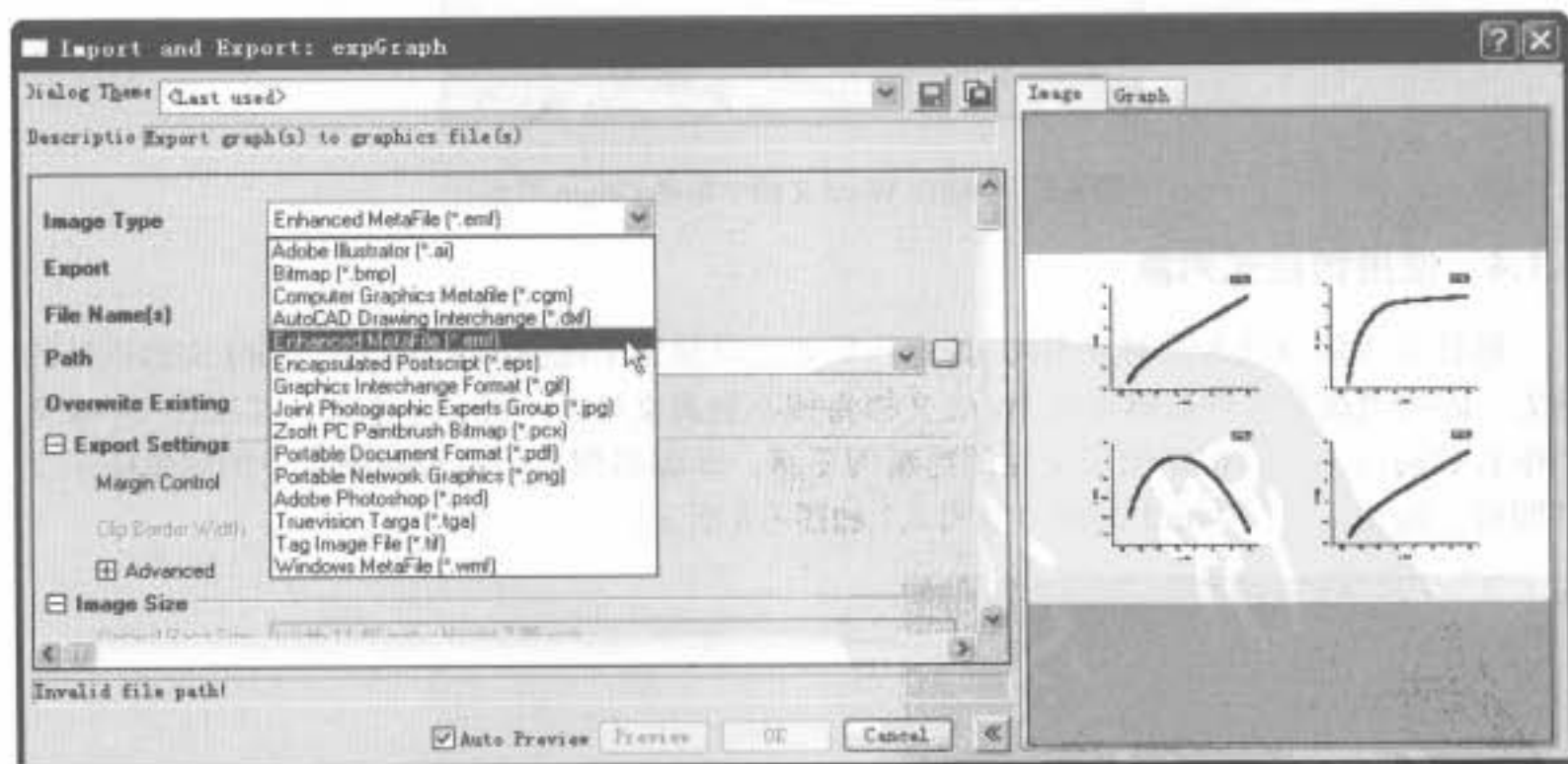


图 6.9 图形的导出

只要选择一种图形文件格式,然后输入文件名和文件保存路径,单击 OK 按钮即可保存文件,问题是 Origin 支持多种的图形格式,每种格式的适用范围并不相同。

要讨论图形格式的问题,首先要明白图形可以分成两大类:一类是矢量图形(vector),这种图形是以点、直线和曲线等形式保存在文件中的,文件很小,可以无级缩放而不会失真,适合于各种各样的分辨率(既适合屏幕显示,又适合打印输出)。另一类是位图或称光栅图

(raster), 这类图形保存后文件很大, 一般不宜放大, 一放大就可能失真, 受制于图形的分辨率, 使用场合不同分辨率也要不同。

Origin 软件支持图形格式及其特性列举见表 6.1。

表 6.1 图形的格式及其特性

格式来源软件	扩展名	格 式	适用范围及特性
Adobe Illustrator	(*AI)	矢量图	
Bitmap	(*BMP)	光栅图	Windows 通用
Computer Graphics Metafile	(*CGM)	矢量图	
AutoCAD Drawing Interchange	(*DXF)	矢量图	
Encapsulated PostScript	(*EPS)	矢量图	出版
Enhanced Metafile	(*EMF)	矢量图	Windows 通用
Graphics Image Format	(*GIF)	光栅图	网络, 最多 256 色
JPEG, Joint Photographic Experts Group	(*JPG)	光栅图	网络, 真彩图有损压缩
Zsoft PC Paintbrush Bitmap	(*PCX)	光栅图	
Portable Network Graphics	(*PNG)	光栅图	网络
Truevision Targa	(*TGA)	光栅图	出版
Portable Document Format	(*PDF)	矢量图	出版
Adobe PhotoShop	(*PSD)	光栅图	
TIFF, Tag Image File	(*TIF)	光栅图	出版
Windows Metafile	(*WMF)	矢量图	Windows 通用
X-Windows Pix Map	(*XPM)	光栅图	
X-Windows Dump	(*XWD)	光栅图	

6.2.2 图形格式选择

虽然 Origin 支持多种格式, 但是实际使用中, 有一些格式很重要的而另一些则不常用它们包括矢量图形格式中的 EPS 和 EMF 或 WMF, 位图格式中的 TIF 和 GIF 或 PNG。

前面已经讨论过, 矢量图在处理曲线图形时拥有大量的优秀特性, 这类格式最适合于在文档中插入(可以无级缩放而不失真)和输出到打印机中进行打印(因为分辨率无关, 因此可以得到最高质量的图形)。在所有的矢量图形格式中, EPS 是一种平台和打印机硬件无关的矢量图, 是所有矢量图的首选格式, 而 EMF/WMF (EMF 是 WMF 的扩展)两种格式则是 Windows 平台中最常用的矢量图格式, 也属于最佳选择。

图 6.10 是 EMF 格式输出的对话框, 其中要留意的是 File Name 文件名部分, 默认的文件名是 Long Name, 自动命名, 这样再次输出时可能会提示是否覆盖原图, 如果需要改名, 直接输入文件名即可。输出文件后, 在 Word 中通过插入菜单中的插入图形命令, 导入文件到文档中, 再进行大小调整好可, 调整时请保持图形的纵横比(按 Shift 键用鼠标调整)。

为什么矢量图格式有这么多优点还要使用位图呢? 这是因为很多情况下出版印刷并不支持矢量图, 而一般只支持 TIF 位图格式(网络环境中要选择 GIF 或 PNG 格式)。

由于位图受到多个因素的影响, 因此其参数要比矢量图复杂一些, 重点要留意图形的分辨率问题, 因为如果图形分辨率太小, 印刷质量将会非常差, 建议的分辨率 DPI Resolution 是 600 或者 1200, 这也是很多杂志社要求的分辨率, 如图 6.10 和图 6.11 所示。



图 6.10 输出为 EMF 格式文件



图 6.11 输出 TIF 格式

要注意的是，TIF 在提高分辨率后输出的文件非常之大，通常一个文件会达到 100MB，因此在发给出版社时要首先进行压缩，根据经验使用 WinRAR 压缩，压缩率达到 100 倍左右，压缩后每个图形只有 1MB 或更小。如果允许压缩，则选择 ComPassion 选项中的 LZW 压缩方式。

至于 GIF 格式由于是输出到网络中的，只要使用 72-96 DPI 即可。PNG 格式可以看做是 GIF 格式的扩展（GIF 只支持 256 色图形，PNG 不受此限制）。

要说明的是：除了图形的输出外，分析报告也可以先输出，不过常用的是输出为 PDF 格式文档，输出 PDF 格式时可以选择输出黑白还是彩色。其次电子表格 Worksheet 也可以很方便的输出，如输出为 ASCII 格式文件，以便其他软件进行利用。

6.3 Layout 窗口

使用 Layout 窗口，可以对现有的数据与图表进行排版。理论上来说，通常是直接在 Word 中进行排版的，但当图形比较多或比较复杂的时候，Layout 是一个更好的选择。因为 Layout 排版是基于图形的，整个窗口可以当成是一张白纸，然后多个图形或表格在上面进行随意的排列，而 Word 是基于文字的排版，太多图形的情况下，排版会相当困难。

首先应当通过 File → New 命令新建一个空白的 Layout 窗口，如图 6.12 所示。



图 6.12 空白的 Layout 窗口

要往里面添加内容,可以在 Layout 窗口活动的情况下,通过用鼠标右键单击 Layout 窗口从快捷菜单中选择 Add Graph、Add Worksheet 或 Add Text 分别添加图形、表格和文本,或者用菜单 Layout → Add Graph 和 Layout → Add Worksheet 命令,如图 6.13 和图 6.14 所示。

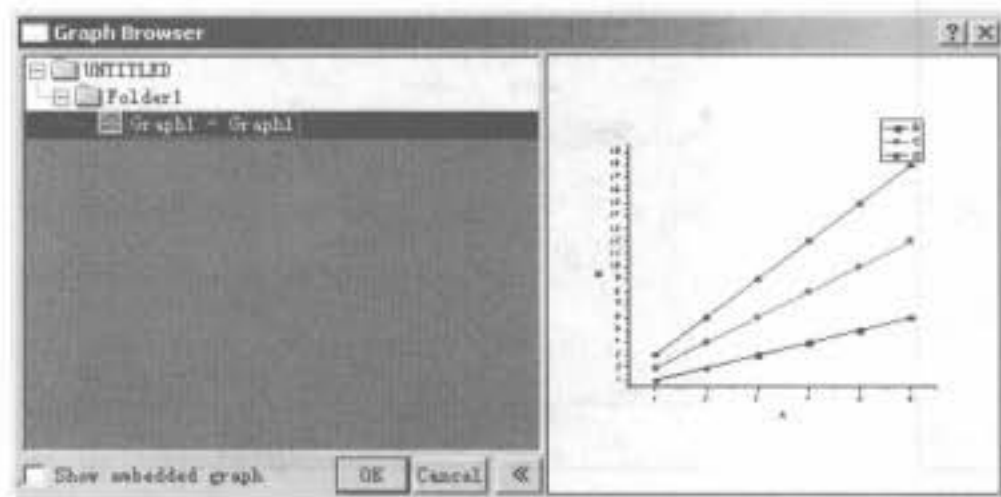


图 6.13 往 Layout 中添加图形窗口



图 6.14 往 Layout 中添加数据表

选中图形或表格后用鼠标左键单击 Layout 窗口,适当地调整大小和位置即可,图 6.15 将图形和表格混合地排列在一起:

另外,也可以先在目标窗口活动的情况下,执行 Edit → Copy Page 命令,然后转到该 Layout 窗口,执行 Edit → Paste 命令,即可完成内容的添加,如图 6.16 所示。

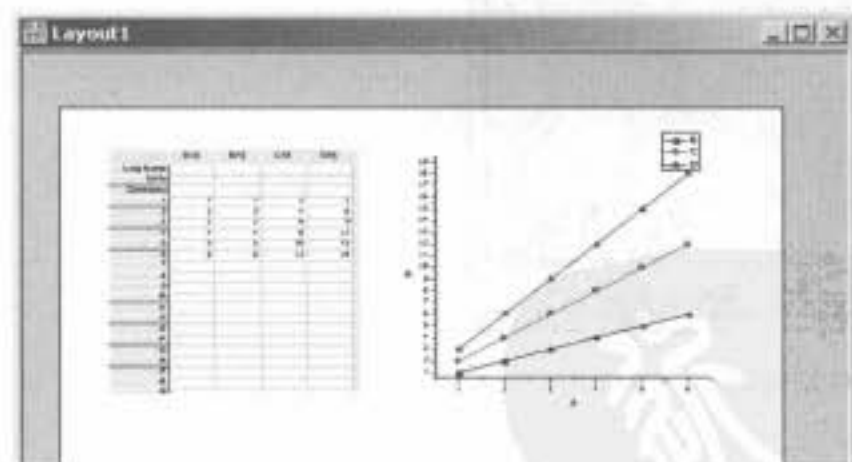


图 6.15 同时在 Layout 窗口中呈现数据表和图形

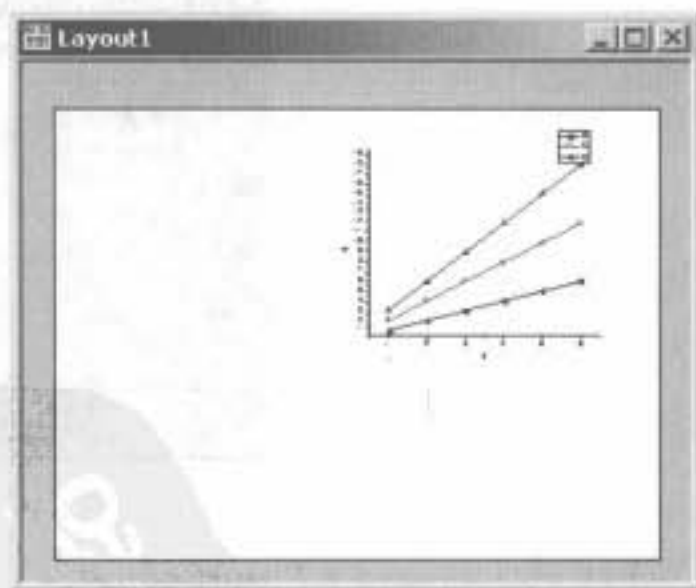


图 6.16 将图形粘贴到 Layout 窗口

如果要调整 Layout 的大小,可以使用文件菜单中的 Page Setup 页面设置命令,相当于设定打印纸。

此外,你还可以右键单击 Layout 窗口里面的对象,选择 Properties 命令,编辑该对象在 Layout 窗口中的属性,如图 6.17 和图 6.18 所示。

(1) Dimensions 选项卡。

Units: 计量单位;

Keep aspect ratio: 是否保持比例;

Position: 对象位置;

Size: 对象尺寸大小。



图 6.17 页面设置对话框



图 6.18 对象属性：规格

(2) Image 选项卡，如图 6.19 所示。

Use picture holder: 是否启用图片占位符；

Background: 背景样式；

Apply to: 应用范围。



图 6.19 对象属性：图像

(3) Control 选项卡，如图 6.20 所示。

Name: 对象名称；

Type: 对象类型描述；

Attach to: 在 Layout 中对象与来源的联系方式；

Visible: 是否可见；

Selectable: 是否可选；

Horizontal Movement: 是否允许水平移动；

Vertical Movement: 是否允许垂直移动；

Resizing: 是否允许修改尺寸大小；

Rotating: 是否允许旋转；

Skewing: 是否允许扭曲对象；

Edit: 是否允许修改对象。



图 6.20 对象属性: 控制

当在 Layout 中添加多个对象时, 通常用 Object Edit 工具条上面的按钮命令来排列对象, 对于多个对象 (图形或数据表) 来说, 对象编辑工具栏的操作是非常重要的, 如图 6.21 所示。

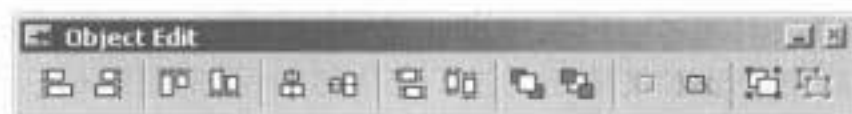


图 6.21 对象编辑工具栏

一个典型的例子是将四个图形排列在一起, 如图 6.22 所示。

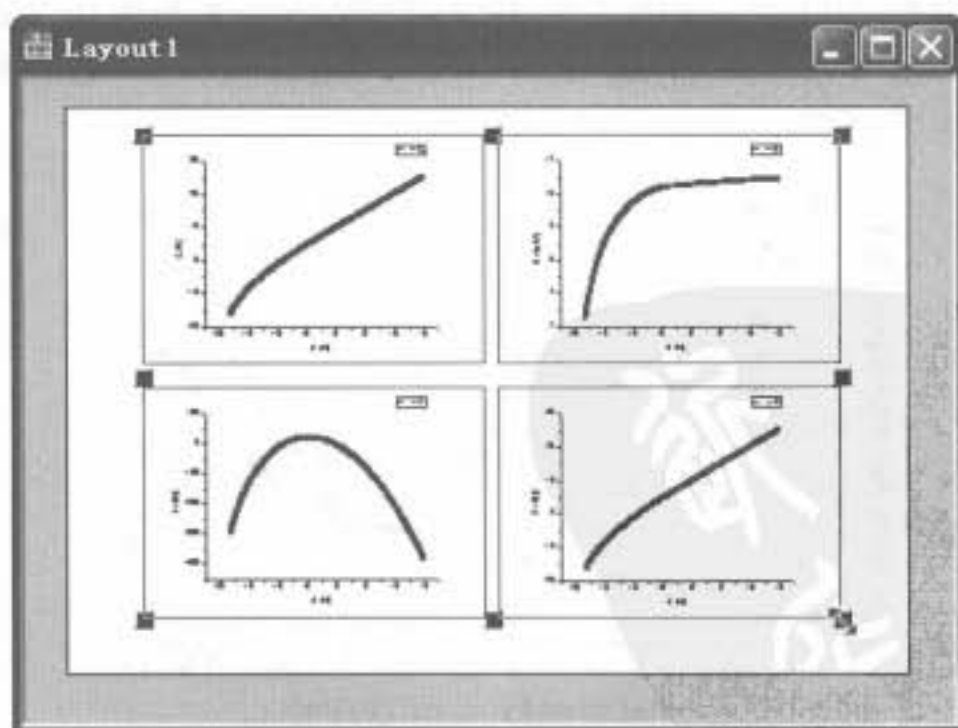


图 6.22 使用对象编辑工具栏排列多个图形

要得到上面的图形, 方法是先分别添加四个图形, 随便放置于 Layout 窗口中, 简单地排列一下, 让四个图形位于 Layout 窗口左上角, 然后使用 Object Edit 工具栏调整四个图形的大小相同, 再两两左对齐和顶对齐, 适当调整一下图形间的距离, 然后同时选中所有四个图形 (使用鼠标或按 Shift 键的同时单击), 用鼠标在四个图形的右下角拉动, 调整大小, 最终结果如图所示。事实上, 图形的个数越多, 使用 layout 窗口和 Object Edit 工具栏的效率越高。

要将 Layout 窗口输出, 直接使用 Edit 编辑菜单中的 Copy Page 命令, 然后粘贴到 Word 中就行。也可以选择将 Layout 窗口导出为图形文件, 再在 Word 中插入使用。

6.4 论文出版图形输出技巧

论文的出版与普通的图形输出略有不同, 首先最后出版的论文要求图形很小, 例如图形宽度要小 6cm (因为是分栏排版), 然而在这么小的图形仍然要“清晰的”阅读到坐标、数据、数据曲线、多曲线比较等等要求, 即要求图形有“可读性”很高, 因此要做一些特殊处理。

下面总结一下学术论文写作和发表时图形的处理技巧, 经大家参考。

- (1) 所有的曲线颜色使用深色调, 因为论文最终以黑白进行印刷。
- (2) 所有线条包括坐标轴加粗, 例如 3 Point 以上。
- (3) 不同曲线使用不同的符号 Symbol, 符号大小调大, 如 36 Point。
- (4) 不要使用图例 (Legend), 可添加 (a) (b) (c) 之类的标记, 在图形标题中再进一步说明。
- (5) 所有在图形中出现的文字, 包括标题、坐标轴数值、标记等等, 全部调到 36 Point。
- (6) 字形的选择原则上是要最终清晰为主, 文字部分可以加粗体, 坐标轴数值不要加粗。
- (7) 如果输出时出现乱码, 则要将出现乱码的符号字体改为中文字体。
- (8) 将图形输出为 EMF 或 EPS 格式, 在文档中插入图形, 保持图形的纵横比调整大小, 并以此为基础, 使用激光打印机打印, 可取得满意质量。
- (9) 在论文出版前, 出版社一般要求单独提供图形文件, 按出版社的要求, 一般要求是 TIF 格式, 600 dpi, 按上小节介绍方法输出, TIF 文件一起打包压缩后通过邮件或网络投稿发给出版社, 如图 6.23 所示。

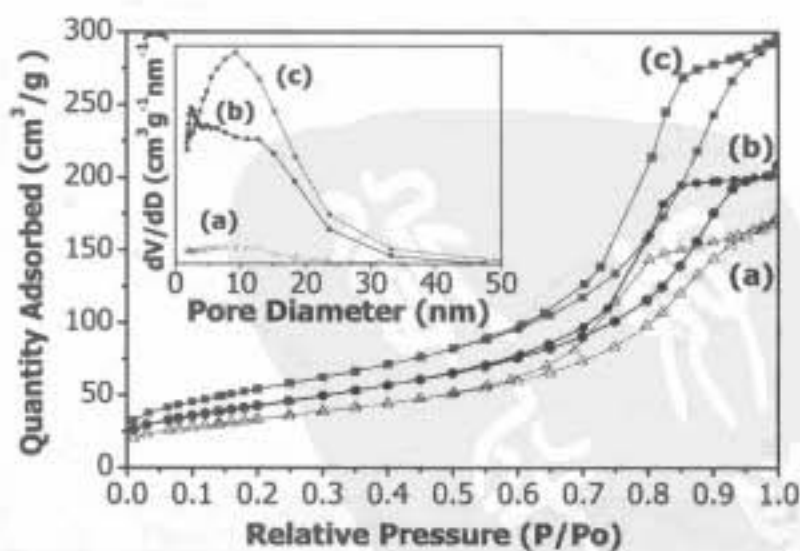


图 6.23 当图形很小时仍然保持可读性

6.5 图形打印

如果想直接输出图形, 可以在 Origin 中进行图形打印, 打印的一般步骤是“页面设置”→“打印预览”→“打印”, 其操作是相当简单的。

图 6.24 显示的是打印预览窗口, 图 6.25 是打印对话框。

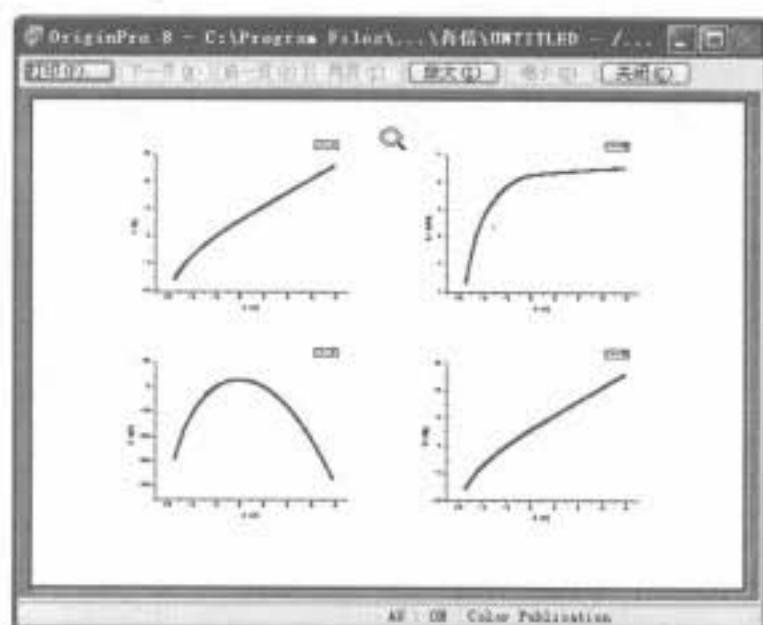


图 6.24 打印预览窗口



图 6.25 打印对话框

对话框中的一些选项是对工作表或矩阵窗口的最大列进行设定,也可以调整打印的颜色。由于打印默认的是当前页面对应纸张大小,因此基本上会整页输出。

Part 3

第三篇

数据分析

本篇内容

- 第7章 曲线拟合
- 第8章 数学运算
- 第9章 信号处理
- 第10章 光谱分析
- 第11章 统计分析
- 第12章 图像处理

本章要点

- 回归分析
- 线性回归
- 非线性拟合
- 自定义函数拟合

7.1 回归分析概述

7.1.1 什么是回归分析

所谓回归 (regression) 分析, 简单地说, 就是一种处理变量与变量之间相互关系的数理统计方法。用这种数学方法可以从大量观测的散点数据中寻找能反映事物内部的一些统计规律, 并可以按数学模型形式表达出来, 故称它为回归方程 (回归模型)。

例如, 自由落体运动中, 物体下落的距离 S 与所需时间 t 之间, 有如下关系:

$$S = \frac{1}{2}gt^2$$

变量 S 的值随 t 而定 (其他项是常量), 这就是说, 如果 t 有确定值, 那么 S 的值就完全确定了。这种关系就是所谓的函数关系。

回归分析法所包括的内容或可以解决的问题, 概括起来有如下 4 个方面: ①根据一组实测数据, 按算法原理建立方程, 解方程得到变量之间的数学关系式, 即回归方程式。②判明所得到的回归方程式的有效性。回归方程式是通过数理统计方法得到的, 是一种近似结果, 必须对它的有效性作出定量检验。③根据一个或几个变量的取值, 预测或控制另一个变量的取值, 并确定其准确度 (精度)。④进行因素分析。对于一个因变量受多个自变量 (因素) 的影响, 则可以分清各自变量的主次, 和分析各个自变量 (因素) 之间的互相关系。

回归分析方法是处理变量之间相关关系的有效工具, 它不仅提供建立变量间关系的数学表达式——经验公式, 而且利用统计学中的抽样理论来检验样本回归方程的可靠性, 具体又可分为拟合程度评价和显著性检验, 从而判断经验公式的正确性。

回归 (Regression) 分析也可以称为拟合 (Fitting), 回归是要找到一个有效的关系, 拟合则要找到一个最佳的匹配方程, 两者虽然略有差异, 但基本是同一个意思。

回归分析就是找到因变量与自变量之间的确定函数关系, 而函数模型是无穷无尽的, 讨论每一个模型已经远远超出了本书的内容, 因此不可能面面俱到, 如果需要, 请读者自行参考相关书籍。

不过我们应该了解的是, Origin 软件为回归分析提供了非常强大的功能, 支持大量的函数模块, 甚至可以自定义函数拟合。另外, 要明白到每一种模型都对应着的是若干常量、变量、函数图形和一定的物理意义, 也就是说, 模型不是随便选择的, 而是按需选择。

7.1.2 回归分析的分类

回归分析按照以下两个因素进行分类:

(1) 根据方程涉及变量的个数。

1) 如果只有一个自变量则称为一元回归, 其模型如下:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon$$

其中 x 为自变量, y 为因变量; β_0 、 β_1 为参数 (常数), ε 为随机误差项。对于误差项, 在回归分析中有如下假设: ①误差项是随机变量, 它的期望值为 0。②对于所有的 x 值, 误差项的方差 σ^2 为常数。③误差项之间相互独立, 即与一个值相联系的误差对与另一个值相联系的误差没有影响。④随机误差项服从正态分布。

有一种特殊的情况, 即 y 与 x 的指数存在相关, 即:

$$y = b_0 + b_1 x + b_2 x^2 + \cdots + b_k x^k + \varepsilon$$

这就是多项式回归 (polynomial regression)。多项式回归的最大优点就是可以通过增加 x 的高次项对实测点进行逼近, 直至满意为止。事实上, 多项式回归可以处理相当一类非线性问题, 它在回归分析中占有重要的地位, 因为任一函数都可以分段用多项式来逼近。因此, 在通常的实际问题中, 不论依变量与其他自变量的关系如何, 我们总可以用多项式回归来进行分析。



说明 以上讨论的是一元多项式回归, 多项式回归也可以是多元, 在此不作讨论。

2) 如果超过一个自变量, 则称为多元回归 (multiple regression), 其模型如下:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots + \beta_k x_k + \varepsilon$$

其中 x_1 、 x_2 、 x_k 为自变量; y 为因变量; β_0 、 β_1 、 $\beta_2 \cdots$ 为系数 (常数项和偏回归系数)。

(2) 根据自变量和因变量函数关系是直线还是曲线。

1) 线性回归 (linear regression)。如上面提到的自由落体运动例子就是线性回归, 准确的可以称为一元线性回归。

而 $y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots + \beta_k x_k + \varepsilon$ 则称为多元线性回归 (multiple linear regression)。

要注意的是, 很多函数关系看起来不像线性相关, 但其实完全可以经过数学变换后得到线性关系, 例如 $y = ax + bx^2 + c \sin(x)$, 仍然要尽量以线性关系处理。

线性回归主要是根据最小二乘法原理, 通过对微分方程组求偏导数, 解出各个常数项, 从而最终得到定量公式。

2) 非线性回归 (nonlinear regression), 其模型如下:

$$y = f(X, \beta) + \varepsilon$$

这里 X 是可观察的独立随机变量, β 是待估的参数向量, Y 是独立观察变量, 它的平均数依赖于 X 与 β , ε 是随机误差。函数形式 $f()$ 是已知的。

非线性回归 (nonlinear curve fitting) 处理的情况要比线性回归复杂得多, 需要进行大量的尝试。因此除了依赖计算进行反复运算逼近, 用户自己对参数的取值范围和估算也很重要。

7.1.3 回归分析的过程

(1) 确定变量。包括变量的个数、自变量和因变量。

(2) 确定数学模型。即自变量和因变量之间的关系。确定数学模型有两点要注意, 一是能否通过数据变换找到尽可能简单的模型, 因为模型越简单, 处理越方便, 思路越清楚; 二是模型中相关参数是否有物理意义, 这一点是很重要的, 因为实验模型并不是纯数学游戏, 计算参数是为了解决问题, 因此如果引入的参数没有确定的物理意义, 这显然不是一个好的模型, 即使这个函数将数据拟合得很好。

(3) 交由计算机软件进行反复逼近, 有必要时进行人为干预。计算机与人类相比的主要好处一是运算速度快得多, 二是计算过程精确不会错漏, 但如果模型是错误的, 则运算结果将会错得更远, 因此人为干预是必不可少的。

(4) 根据运算结果, 特别是相关系数进行检验。理论上相关系数越接近 1 越好, 但也要结合常识对结果参数的物理意义特别是取值范围进行判断。

(5) 如果结果不满意, 则重新修改模型的参数再进行运算。

7.2 线性拟合

线性拟合分析是数据分析中最简单但最重要的一种分析方法, 其主要目标是寻找数据集中数据增长的大致方向, 以便排除某些误差数值, 以及对未知数据的值做出预测。

Origin 按以下算法把曲线拟合为直线: 对 X (自变量) 和 Y (因变量), 线性回归方程为 $Y = A + BX$, 参数 A (截距) 和 B (斜率) 由最小二乘法求算。

7.2.1 线性拟合实例

首先, 建立数据表, 导入要进行分析的数据, 通过 File → Import 命令打开 C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Curve Fitting\Linear Fit.dat。

然后选中要分析的数据, 生成散点图, 如图 7.1 和图 7.2 所示。

	A(0)	B(Y)	C(Y)	D(Y)
Long Name				
Units				
Comments				
1	1	0.19344	-0.17723	0.60217
2	1.5	2.05124	3.2872	2.73368
3	2	0.8005	0.05259	0.844
4	2.5	4.78861	4.43246	4.05003
5	3	2.38268	2.35852	2.6163
6	3.5	3.70147	3.6181	4.25919
7	4	5.65325	4.96127	5.91891
8	4.5	5.71434	4.89645	6.02568
9	5	6.89482	6.13849	6.42774
10	5.5	9.5293	11.50031	9.57782
11	6	6.62465	6.39728	6.97919
12	6.5	6.18677	5.94413	6.24221

图 7.1 原始数据

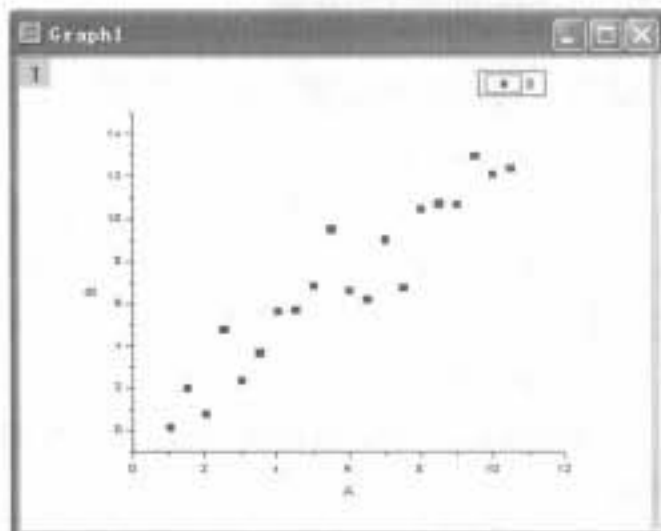


图 7.2 使用原始数据绘制散点图

再通过 Analysis → Fitting → Fit Linear 命令打开 Linear Fit 对话框, 设置相关的拟合参数, 如图 7.3 所示。



图 7.3 线性拟合对话框

设置好参数之后, 单击 OK 按钮即可生成拟合曲线以及对应的分析报表, 如图 7.4 和图 7.5 所示。

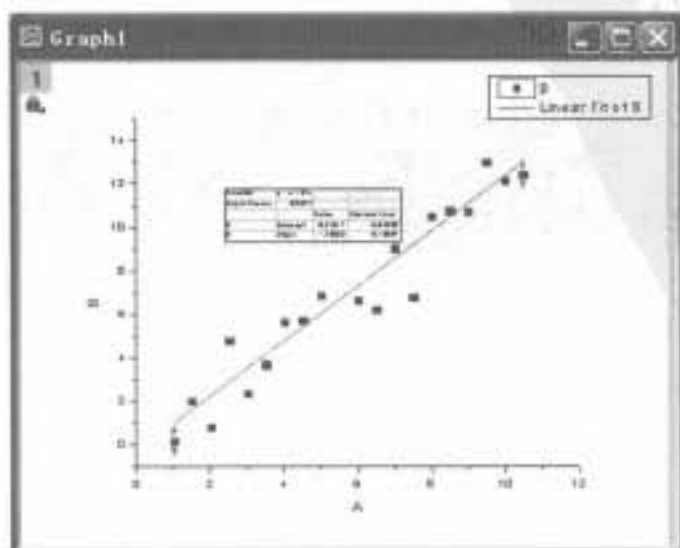


图 7.4 线性拟合结果

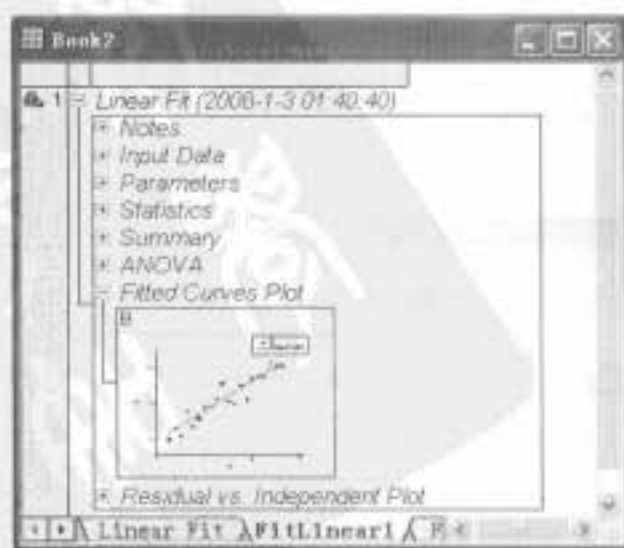


图 7.5 拟合结果分析报表

7.2.2 拟合参数的设置

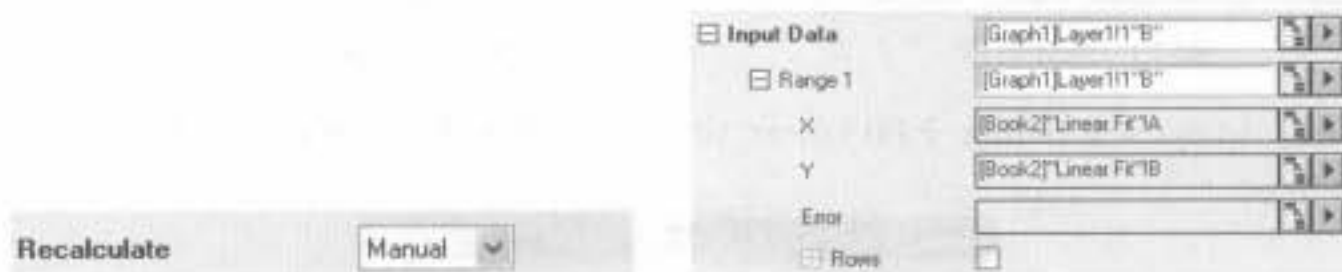
拟合参数设置对话框中，包含以下几项设置：

(1) Recalculate。

在 Recalculate 一项中，可以设置输入数据与输出数据的连接关系，包括 Auto（自动）、Manual（手动）、None（无）3 个选项。Auto 是当原数据发生变化后自动进行线性回归，Manual 是当数据发生变化后，用鼠标单击快捷菜单手动选择更算，None 则不进行任何处理。

(2) Input Data。

Input Data 项下面的选项可用于设置输入数据的范围，主要包括：输入数据区域以及误差数据区域。



在选择数据范围的对话框中，单击 按钮表示要重新选择数据范围，会打开一个数据选择对话框：，则可以使用鼠标选择所需数据及范围后，单击对话框右边的 按钮进行确认。如果读熟悉 Excel 的操作，应该不会感到陌生。

而如果单击 按钮，则出现快捷菜单，也可以对数据源进行调整，如果选择最后一个子菜单 Select Columns 则会打开 Dataset Browser 数据集浏览器，可以对当前项目中的所有数据进行选择、增删和设置，如图 7.6 和图 7.7 所示。

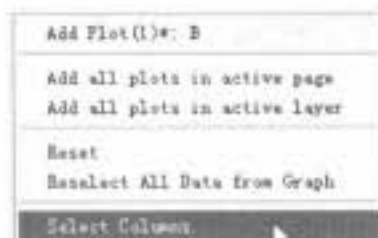


图 7.6 选择数据来源



图 7.7 数据集浏览器

和 两个按钮在 Origin 的其他对话框中大量出现，使用方法基本相同，不再重述。

(3) Fit Options。

在 Fit Options 项下，可以设置包括：

- 1) Errors as Weight: 误差权重；
- 2) Fix Intercept 和 Fix Intercept at: 拟合曲线的截距的限制，如果选择 0 则通过原点；

- 3) Fix Slope 和 Fix Slope at: 拟合曲线斜率的限制;
- 4) Use Reduced Chi-Sqr: 这个数据也能揭示误差情况;
- 5) Apparent Fit: 可用于使用 log 坐标对指数衰减进行直线拟合。



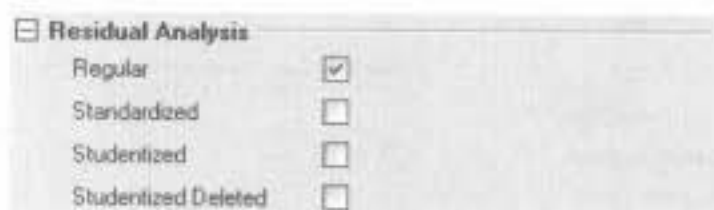
(4) Quantities to Compute。

Quantities to Compute 项下可以设置的有:

- 1) Fit Parameters: 拟合参数项;
- 2) Fit Statistics: 拟合统计项
- 3) Fit Summary: 拟合摘要项;
- 4) ANOVA: 是否进行方差分析;
- 5) Covariance matrix: 是否产生协方差 Matrix;
- 6) Correlation matrix: 是否显示相关性 Matrix。

(5) Residual Analysis。

Residual Analysis 项下面可以设置几种残留分析的类型。



(6) Output Results。

在 Output Results 项下面是一些输出内容与目标的选项, 定制分析报表。



- 1) Paste Result Tables to Graph: 是否在拟合的图形上显示拟合结果表格。
- 2) Output Fitted Values To: 分析结果输出到哪里, 默认是在当前工作簿上新建工作表用

于输出，其他选择包括 Result Log 窗口、Note 窗口等。

3) Output Find Specific X/Y Tables: 输出时包含一个表格，自动计算 X 对应的 Y 值或者 Y 对应的 X 值。如有当下面的 Find Specific X/Y 选中才会出现。

(7) Fitted Curves Plot。

在 Fitted Curves Plot 项下，可以设置一些拟合图形的选项：

1) Plot on Original Grapg: 在原图上作拟合曲线的方式；

2) Update Legend on Original Graph: 更新原图上的图例；

3) X Data Type: 设置 X 列的数据类型，包括 Points (数据点数目) 和 Range (数据显示区域)；

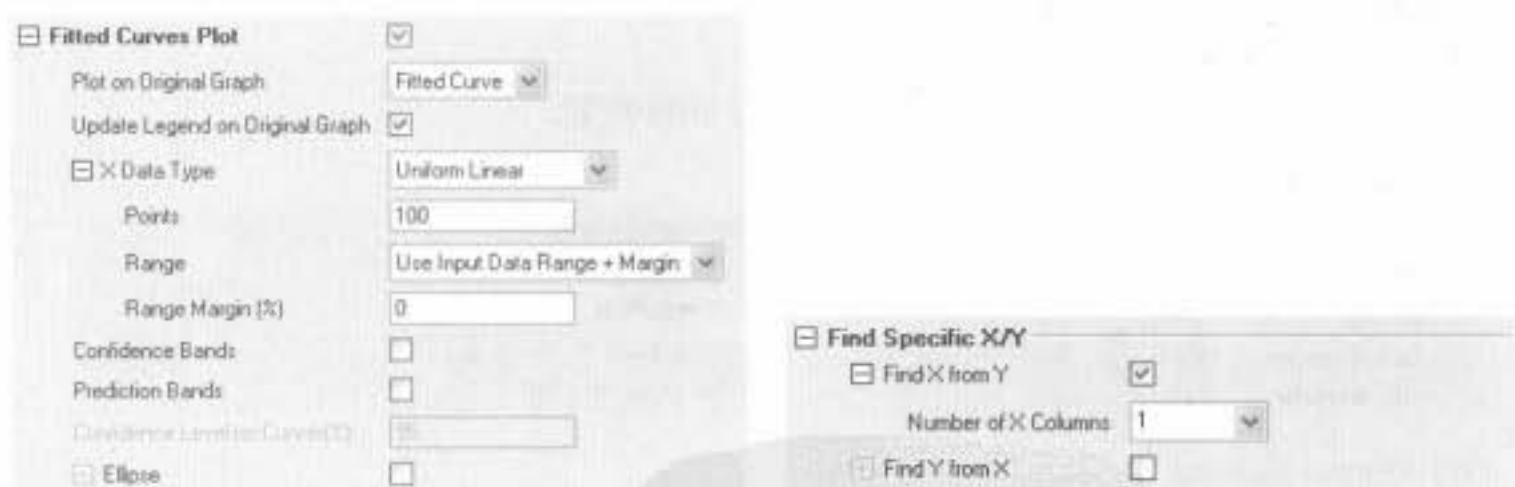
4) Confidence Bands: 显示置信区间；

5) Prediction Bands: 显示预计区间；

6) Confidence Level for Curves(%): 设置置信度；

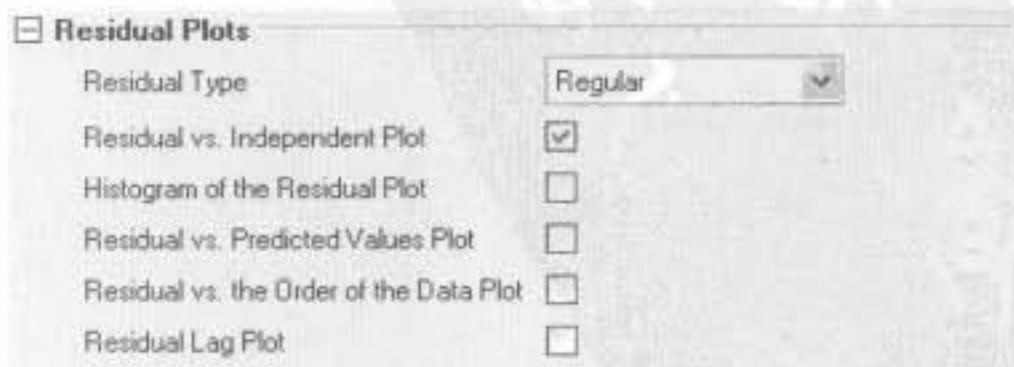
(8) Find Specific X/Y。

Find Specific X/Y 项主要是用于设置是否产生一个表格，显示在 Y 列或 X 列中寻找另一列所对应的数据。这里简单说明一下，很多学习者对于根据 X 值或 Y 值寻找对应的 Y 值或 X 值很有兴趣，然而，只有在 X 和 Y 建立了一定函数关系之后，这种方式才成为可能，建立这个表格，相当于无需自己手工运算函数的结果。



(9) Residual Plots。

Residual Plots 项主要是设置一些残留分析的参数。



7.2.3 拟合结果的分析报表

(1) Notes。

主要是记录一些信息诸如用户、使用时间等，此外还有拟合方程式。

Notes

Description	Perform Linear Fitting
User Name	zapdos
Operation Time	2008-1-3 01:40:40
Equation	$y = a + b \cdot x$
Report Status	New Analysis Report
Weight	No Weighting

(2) Input Data.

显示输入数据的来源。

(3) Parameters.

显示斜率、截距和标准差。

Input Data

Input X Data Source	Input Y Data Source	Range
[Book2]Linear Fit!A	[Book2]Linear Fit!B	[1*20*]

Parameters

		Value	Standard Error
B	Intercept	-0.24317	0.64366
	Slope	1.25883	0.10007

(4) Statistics.

显示一些统计数据如数据点个数等,重要的是 R-Square (R 平方) 即相关系数,这个数字越接近±1 则表示数据相关度越高,拟合越好,因为这个数值可以反映实验数据的离散程度,通常来说两个 9 即 0.99 以上是有必要的。

(5) Summary.

显示一些摘要信息,就是整合了上面几个表格,斜率、截距和相关系数是我们关心的。

Statistics

	B
Number of Points	20
Degrees of Freedom	18
Residual Sum of Squares	29.9843
Adj. R-Square	0.8922

Summary

	Intercept		Slope		Statistics
	Value	Error	Value	Error	Adj. R-Square
B	-0.24317	0.64366	1.25883	0.10007	0.8922

(6) ANOVA.

显示方差分析的结果。

ANOVA

		DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Prob>F
B	Model	1	263.44895	263.44895	158.25789	2.35151E-10
	Error	18	29.9643	1.66468		
	Total	19	293.41325			

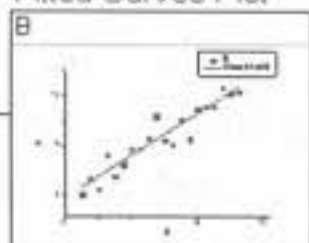
(7) Fitted Curves Plot.

显示图形的拟合结果缩略图。在这里再次显示图形看似多此一举,其实这是因为系统假设分析报告将要单独输出用于显示。

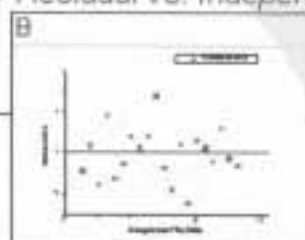
(8) Residual vs. Independent Plot.

可以在 Linear Fit 对话框的 Residual Plots 项下设置要显示的图表。

Fitted Curves Plot



Residual vs. Independent Plot



7.2.4 关于分析报表

分析报表 (Analysis Report Sheets) 是新版本其中一个重要的改进。

8.0 以前版本, 分析结果比较简单, 通常直接采用 Log Results 窗口输出, 格式比较简陋, 不同分析结果的用语也并不统一。如果希望利用分析结果的数据, 往往要用户自己在 Log 记录中仔细阅读, 并自行复制出来, 实际使用时比较麻烦。究其原因一是因为当时软件中没有使用结构足够复杂以适合数据输出的报表模块; 二是因为以前的数据分析模块使用的参数比较简单, 功能比较有限, 因此不会产生复杂的输出。

而新版本重新设计了全新的电子表格模块, 支持复杂的格式输出; 另一方面, 新版本的分析模块中由用户自行控制的参数成倍的增加 (这将大大地提高分析的灵活性); 所以, 有必要使用一个专门的输出模块来呈现分析结果, 这就是分析报表 (Analysis Report Sheets)。

更重要的是, 新版本中的分析报表并不仅仅是用来显示分析结果的“静态”报表, 而更像一种分析模板, 也即是“动态”报表。简单地来说, 数据源可以动态改变 (分析结果会自动重新计算), 或者分析参数可以随时调整 (分析结果也自动重算)。这种功能显然已经超越了结果输出呈现的范畴, 大大地提高了用户工作的效率。

一份典型的分析报表如图 7.8 所示。

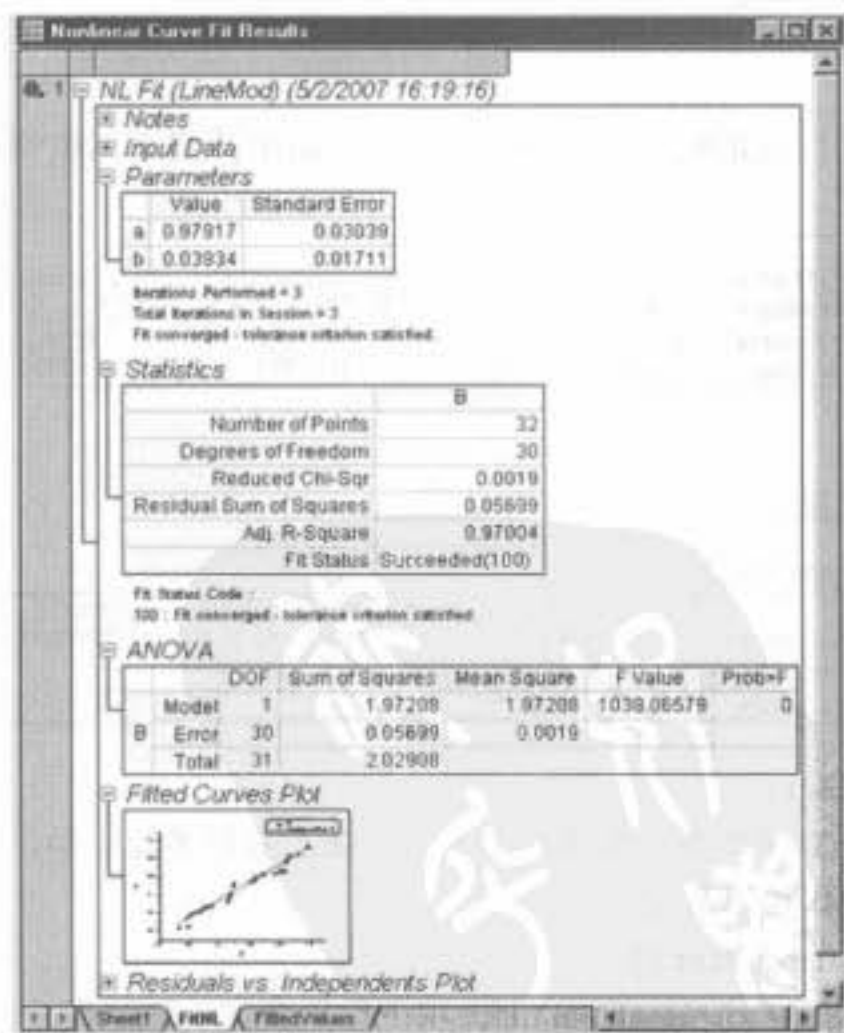


图 7.8 典型的分析报表

从图中可以大概的看到: ①报表是按树形结构组织的, 可以根据需要进行收缩或展开; ②每个节点的数据输出的内容可以是表格、图形、统计和说明; ③报表的呈现形式是电子表格 (Worksheet), 只是没有把所有表格线显示出来而已; ④除了分析报表外, 分析报表附带所需的一些数据还会生成一个新的结果工作表 Worksheet。

7.2.5 报表基本操作


报表 (Report Table) 的操作主要是通过右键的快捷菜单进行的, 下面是一些主要操作的简介:

- (1) User comments: 添加注释;
- (2) Copy Table: 复制表格内容;
- (3) Copy Footnote: 复制脚注信息;
- (4) Create Copy As New Sheet: 把表格内容复制到一个新的 Worksheet;
- (5) Create Transposed Copy As New Sheet: 把表格转置后的内容复制到一个新的 Worksheet;
- (6) Expand: 展开表格内容;
- (7) Collapse: 把表格折叠起来;
- (8) Copy/Paste Format: 复制表格格式;
- (9) Edit Formatting...: 打开 Worksheet Theme Editor 对话框, 编辑 Worksheet 样式;
- (10) View: 设置表格外观。

7.2.6 报表中的图形编辑

要编辑报表里面的 Graph 图形, 只要双击 Graph, 即可以打开相应的 Graph 窗口进行编辑。

(1) 工作表中的拟合结果数据。

在生成的结果表格中, 一些列的标签上打上  锁定记号, 以防止随意被改动。被打上这种记号的, 是在拟合参数设置对话框的 Recalculate 选项中已设置为 Manual 或 Auto。也就是说, 当外部参数 (包括数据源和拟合参数) 发生改变时会重新计算, 一般来说, 不要随意改动分析报表中的数据。非要改变时, 可以设置 Recalculate 为 None, 则不会显示锁定记号。

(2) 分析模板。

建立分析模板 Analysis Template 的好处是可以重复使用, 大大减少工作量提高效率。

有两种方式可以将分析模板贮存起来: 一种是直接保存为项目文件 (OPJ), 一种是保存为工作簿 (OTW)。后者随时追加到新项目中 (在当前项目下, 通过文件菜单的打开 Open 命令打开 OTW 文件)。

如果要保存为分析模板, 则分析选项中的 Recalculate 重新计算选项一般要设置为 Auto。

不管哪一类形式, 由于分析报表已经与源数据关联, 因此当源数据发生改变后, 分析报表也会自动重新计算分析结果。也就是说, 用户可以导入新的数据, 或手动改变源数据, 分析结果也会跟着发生改变, 而无需重新设置参数。

可见, 分析模板可以方便反复运算, 或者用于分析模块参数的共享。

(3) 分析报表的输出。

我们已经发现分析报表是一个完整的报告文件, 同图形文件一样, 这个报表可以通过 File (文件) 菜单的 Export 命令进行导出, 典型的是导出为 PDF (Portable Document Format) 格式, 这是一种跨平台的文档格式, 也是学术论文的国际通用格式, 可以使用免费的 Acrobat Reader 进行浏览或打印, 能够保证在不同国家、不同计算机、不同软件平台和不同打印机上得到相同的输出结果, 如图 7.9~图 7.11 所示。



图 7.9 将报表输出为 PDF 文档格式

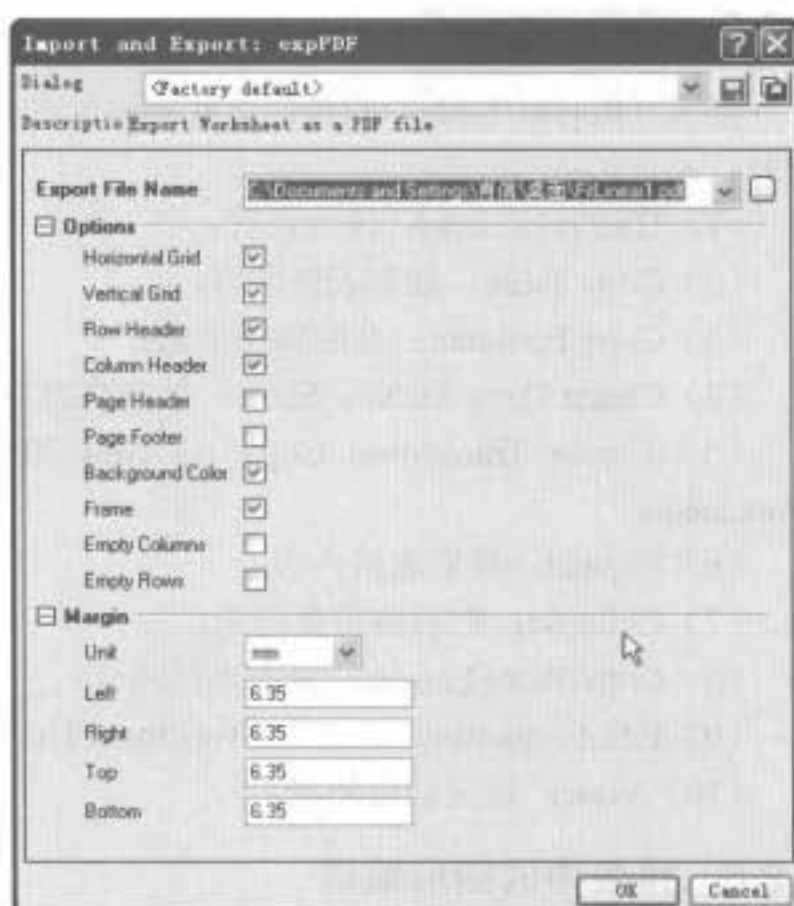


图 7.10 输出 PDF 文档参数



图 7.11 使用 Acrobat Reader 打开报表文档

7.2.7 多元线性回归

要对数据进行多元线性回归分析 ($y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_k x_k + \varepsilon$) 时, 可以选用 Analysis \rightarrow Fitting \rightarrow Multiple Linear Regression... 命令。

举例说明：首先导入要拟合的数据集，通过 File → Import 命令导入 C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Curve Fitting\Multiple Linear Regression.dat。不要作图，直接选择 Analysis → Fitting → Multiple Linear Regression...命令。此时，Origin 打开 Multiple Regression 的对话框，然后根据需要进行设定，单击 OK 按钮完成。

其中的参数设置以及结果输出请参考线性拟合部分，如图 7.12 所示。

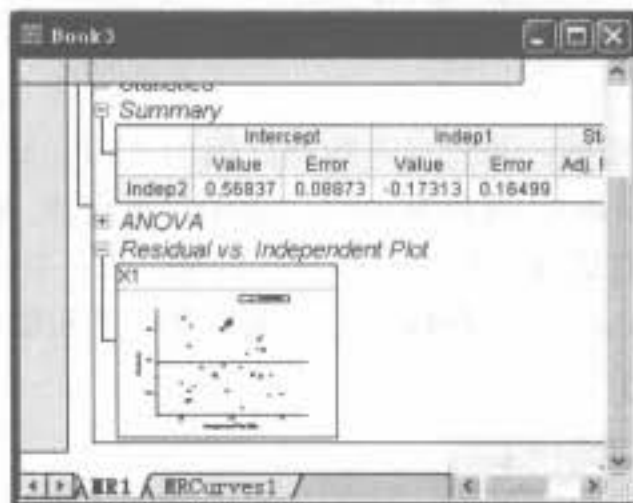


图 7.12 多元线性回归

7.2.8 多项式回归

当选择对曲线用 $Y=A+B_1X+B_2X^2+\dots+B_nX^n$ 这一多项式函数进行拟合时，可以选用 Analysis → Fitting → Fit Polynomial...命令。

举例说明：首先打开要拟合的数据集，通过 File → Import 命令导入 C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Curve Fitting\Polynomial Fit.dat。然后作图生成对应的散点图，激活当前 Graph 窗口选定图层中要被拟合的曲线。

选择 Analysis → Fitting → Fit Polynomial...命令。此时，Origin 打开 Polynomial Fit to ...的对话框，然后根据需要进行设定，单击 OK 按钮完成拟合。

其中的参数设置以及结果输出请参考线性回归，其内容基本相同。

事实上，如果多项式的 $n=1$ ，其实就是 $Y=A+BX$ ，即直线方程。

对于弯曲的图形来说，理论上 n 值越大，拟合结果越好，不过实际使用时 n 值越多，项也就越多，如何解释其物理意义就成了大问题，如图 7.13 所示。

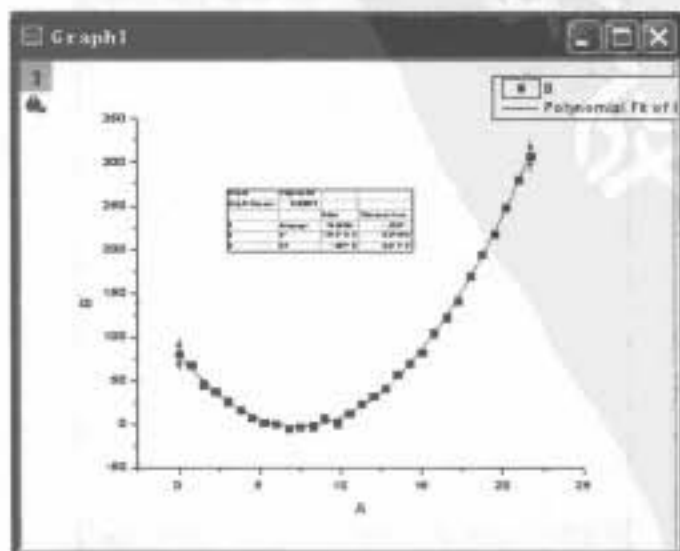


图 7.13 多项式拟合

7.3 非线性拟合

7.3.1 基本过程

除了线性回归外，大部分数据都不能处理成一种直线关系，因此需要使用到非线性函数进行拟合。Origin 软件使用 NonLinear Fitting (NLFit) 对话框来完成这个工作，NLFit 工具内置了超过 200 种的拟合函数，能够适合各种学科数据拟合的要求，每一函数也可以使用具体参数进行定制。

使用 NLFit 工具的实例说明：首先导入数据，例如 C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Curve Fitting\Gaussian.dat，选择 B 列作散点图，再选择 Analysis→Fitting→Nonlinear Curve Fit 菜单项打开 NLFit 对话框。然后选择函数目录，再在目录下选择一个拟合函数（本例使用 Basic 目录下的 Gauss 函数），根据具体情况设置一些初始参数，再单击 Fit 拟合按钮即可，如图 7.14~图 7.16 所示。

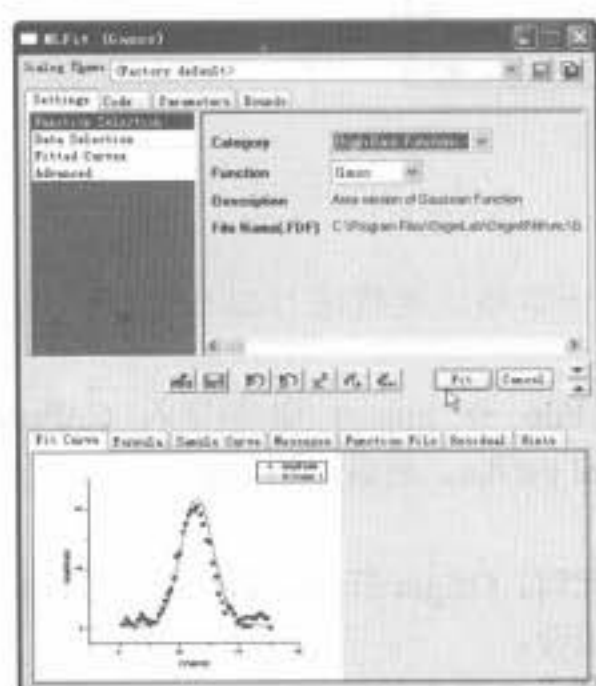


图 7.14 NonLinear Fitting 对话框

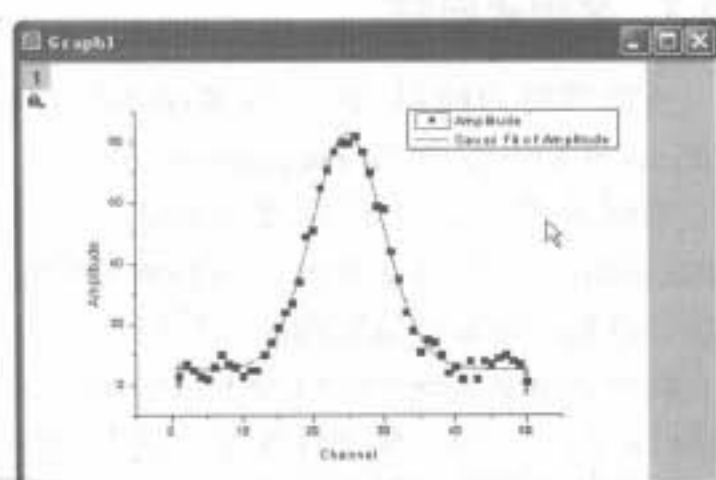


图 7.15 用 Gauss 函数进行拟合

最后会形成分析报告：

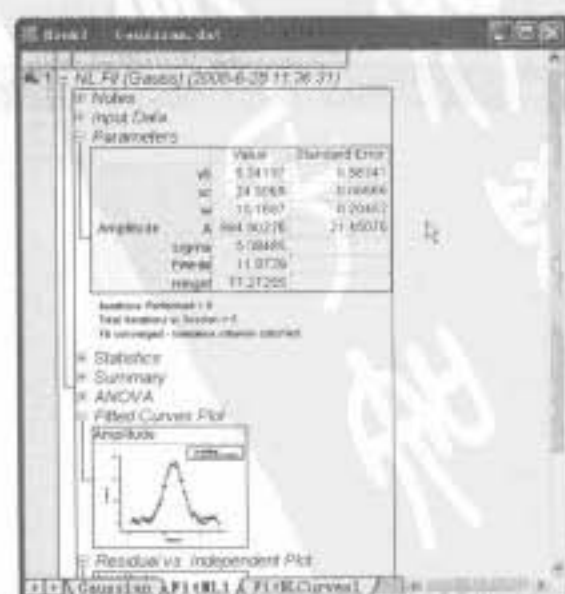


图 7.16 拟合结果报表

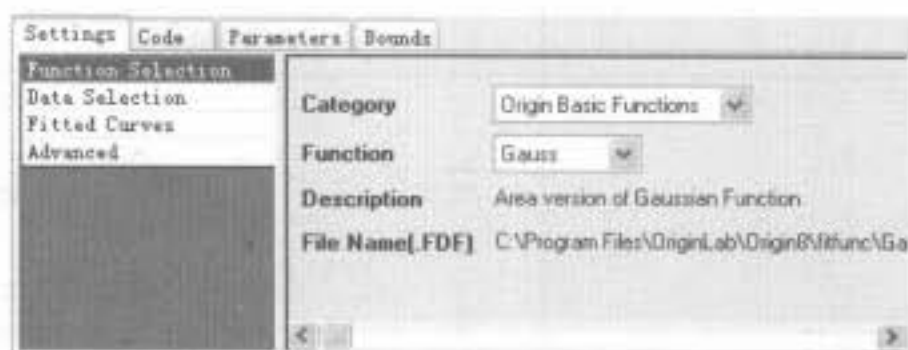
7.3.2 NonLinear Fitting 对话框详解

NLFit 对话框主要由 3 部分组成, 分别是上部的一组参数设置标签、中间的一组主要的控制按钮以及下部的一组信息显示标签。

在控制按钮上部的一组标签, 主要是用来设置拟合的参数:

(1) Setting 标签: 包括 4 个子项:

1) Function Selection: 可以选择要使用的拟合函数, 包括 Category (函数所属种类)、Function (具体的函数)、Description (函数的描述) 和 File Name (函数来源和名称);



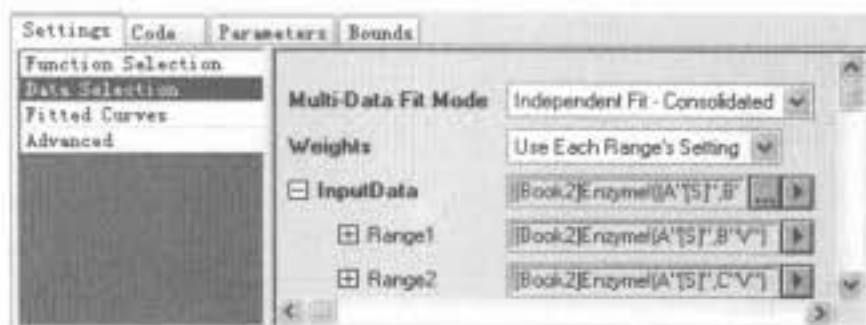
函数目录包括基本类型 (Origin Basic Functions)、按形式分类 (By Form, 包括 Exponential 指数、Growth/Sigmoidal 生长/S 曲线、Hyperbola 双曲线、Logarithm 对数、Peak Functions 峰函数、Polynomial 多项式、Power 幂函数、Rational 有理数、Waveform 波形)、按领域 (By Field, 包括 Chromatography 色谱学、Electrophysiology 生理学、Pharmacology 药理学、Spectroscopy 光谱学、Statistics 统计学) 和用户自定义函数。每一函数目录下通常有 10 多个具体函数, 所有函数总量为 200 多个, 见表 7.1。

表 7.1 各类常用函数的方程及基本图形

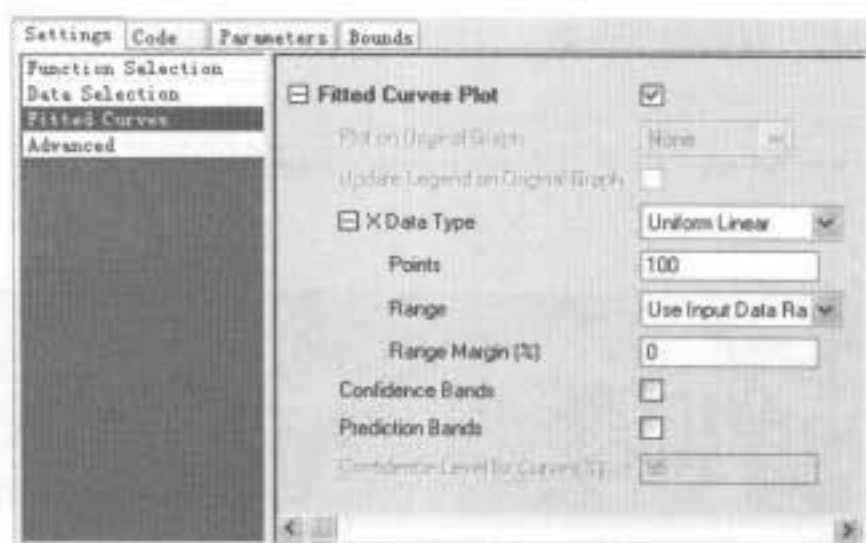
目录名称、函数名称、函数关系	对应曲线图形示例
Exponential: ExpDec2 $y = y_0 + A_1 e^{-x/t_1} + A_2 e^{-x/t_2}$	
Growth/Sigmoidal: DoseResp $y = A_1 + \frac{A_2 - A_1}{1 + 10^{(LOGx0 - x)/p}}$	
Hyperbola: Hyperbl $y = \frac{p_1 x}{p_2 + x}$	
Logarithm: Logarithm $y = \ln(x - A)$	

目录名称、函数名称、函数关系	对应曲线图形示例
Peak Functions: Gauss $y = y_0 + \frac{A}{w\sqrt{\pi/2}} e^{-\frac{2(x-x_c)^2}{w^2}}$	
Polynomial: Cubic $y = A + Bx + Cx^2 + Dx^3$	
Power: Power $y = x^A$	
Rational: Reciprocal $y = \frac{1}{a + bx}$	
Waveform: Sine $y = y_0 + A \sin\left(p \frac{x - xc}{w}\right)$ $A > 0$	
Chromatography: GCAS $f(z) = y_0 + \frac{A}{w\sqrt{2\pi}} e^{-z^2/2} \left(1 + \sum_{i=3}^4 \frac{a_i}{i!} H_i(z) \right)$ $z = \frac{x - x_c}{w}$ $H_3 = z^3 - 3z$ $H_4 = z^4 - 6z^2 + 3$	
Electrophysiology: Boltzman $y = \frac{A_1 - A_2}{1 + e^{(x-x_0)/dx}} + A_2$	
Pharmacology: BiPhasic $y = A_{min} + \frac{(A_{max1} - A_{min})}{1 + 10^{(x-x_1)/dx1}} + \frac{(A_{max2} - A_{min})}{1 + 10^{(x-x_2)/dx2}}$	
Spectroscopy: GaussAmp $y = y_0 + A e^{-\frac{(x-x_c)^2}{2w^2}}$	

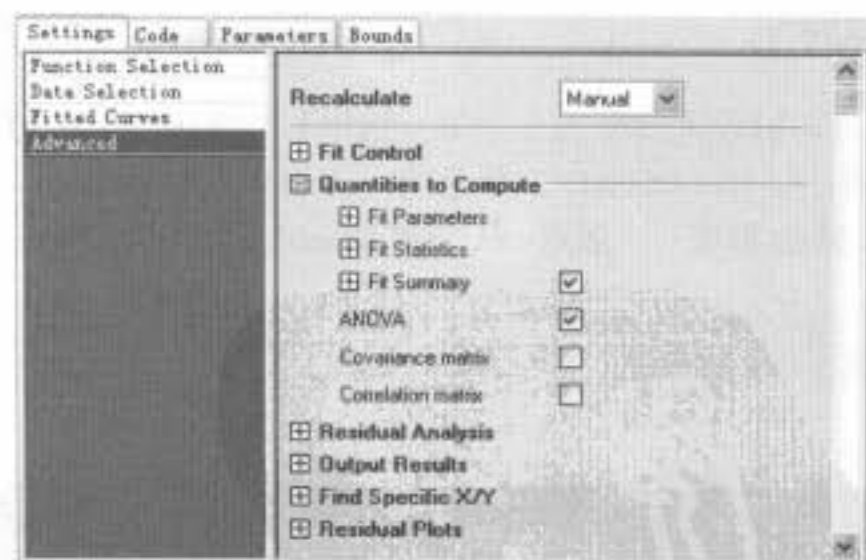
2) DataSelection: 输入数据的设置。



3) Fitted Curves: 拟合图形的一些参数设置。



4) Advanced: 一些高级设置，参考线性拟合部分。



(2) Code 标签: 显示拟合函数的代码、初始化参数和限制条件。



(3) Parameters 标签: 将各个参数列为一个表格, 表格中的列包括。

- 1) Param: 参数名;
- 2) Meaning: 参数的意义;
- 3) Fixed: 是否为固定值;
- 4) Value: 参数值;
- 5) Error: 误差值;
- 6) Dependency: 置信值;
- 7) Lower conf limits: 参数值的下限;
- 8) Upper conf limits: 参数值的上限;
- 9) Significant Digits: 有效数字个数。

Settings	Code	Parameters	Bounds			
Param	Meaning	Fixed	Value	Error	Dependency	Lower Conf Limits
y0	offset	<input type="checkbox"/>	2	--	--	--
xc	center	<input type="checkbox"/>	26	--	--	--
w	width	<input type="checkbox"/>	10.78556	--	--	--
A	area	<input type="checkbox"/>	1152	--	--	--



Value 的值是运算出来的, 如果在前面 Fixed 项打上勾, 则表示该参数已经确定, 运算时只计算其他参数即可。

(4) Bounds 标签: 可以设置参数的上下限, 包括 LB Value (下限值)、LB Control (下限与参数的关系, 一般有 \leq 、 $<$ 和 Disable 3 个选项)、Param (参数名)、UB Value (上限值)、UB Control (上限与参数的关系, 一般有 \leq 、 $<$ 和 Disable 3 个选项)。

Settings	Code	Parameters	Bounds	
LB Value	LB Control	Param	UB Control	UB Value
--	Disable	y0	Disable	
--	Disable	xc	Disable	
0	<	w	Disable	
--	Disable	A	Disable	

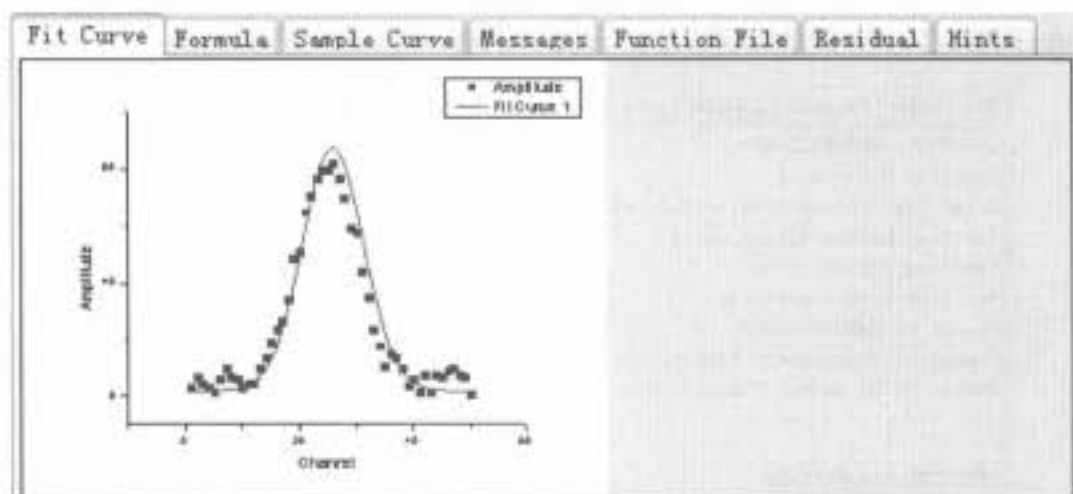
在中间的一组控制按钮包括:

- 1) Create/Edit Fitting Functions: 新建/编辑拟合函数;
- 2) Save FDF File: 保存拟合函数;
- 3) Initialize Parameters: 初始化参数;
- 4) Simplex: 给参数赋予近似值;
- 5) Calculate Chi-Square: 计算 Chi-square 值;

- 6) 1 Iteration: 使当前函数每次运行时只执行一次;
- 7) Fit till Converged: 使当前函数每次运行时不断循环执行直到结果在规定范围内;
- 8) Fit: 对数据进行拟合;
- 9) Cancel: 取消拟合;
- 10) Show Top Panels: 打开上部的参数标签面板;
- 11) Show Bottom Panels: 打开下部的参数标签面板。

在控制按钮下面，是一组信息显示标签。

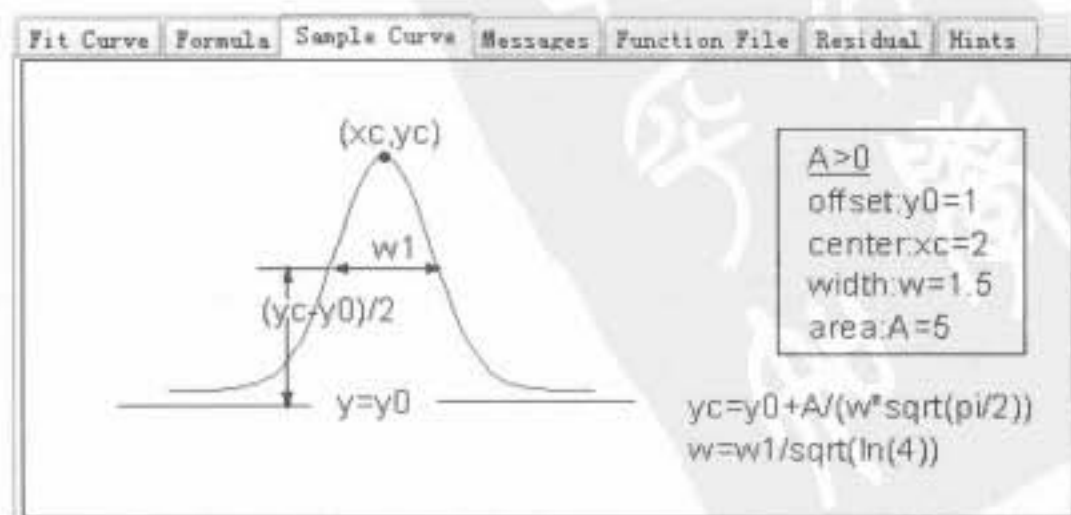
(5) Fit Curve: 拟合结果的预览图。



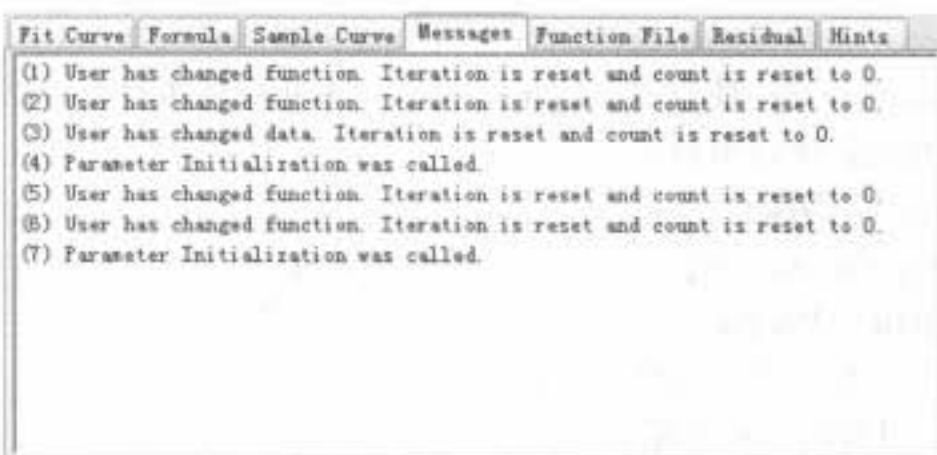
(6) Formula: 拟合函数的数学公式。

$$y = y_0 + \frac{A}{w\sqrt{\pi/2}} e^{-2\frac{(x-x_c)^2}{w^2}}$$

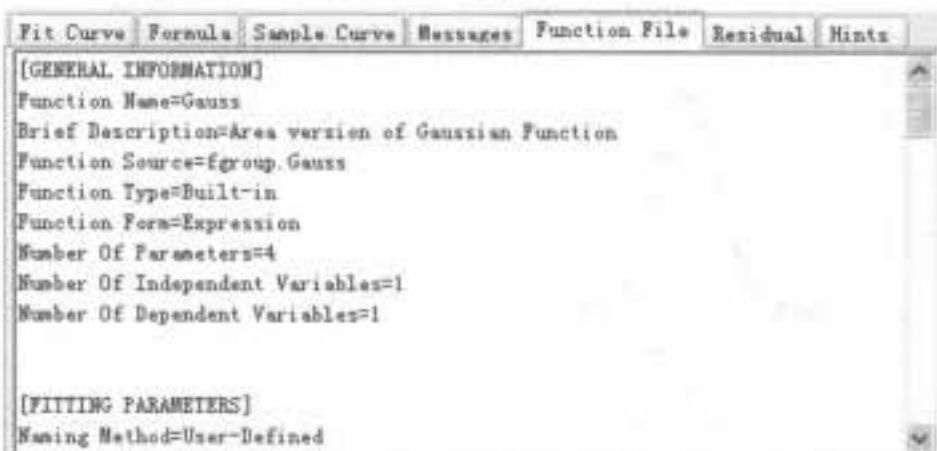
(7) Sample Curve: 显示拟合示例曲线 (图形)。



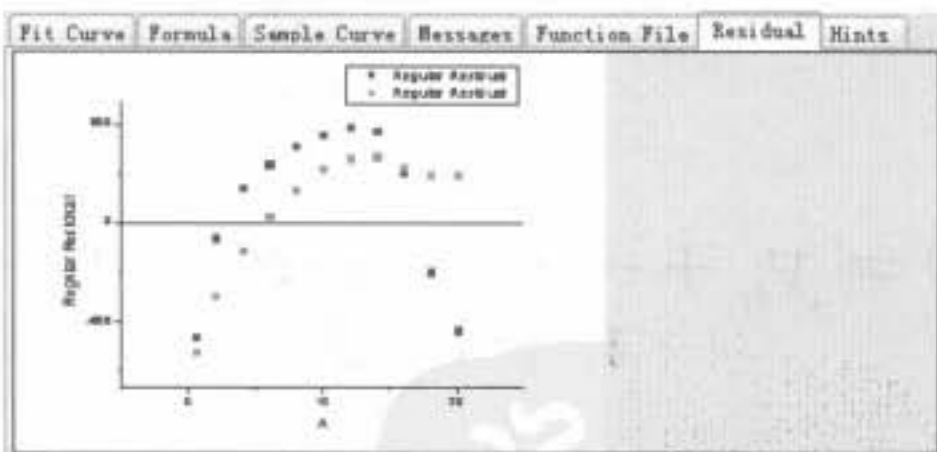
(8) Messages: 显示用户的操作过程, Log 记录。



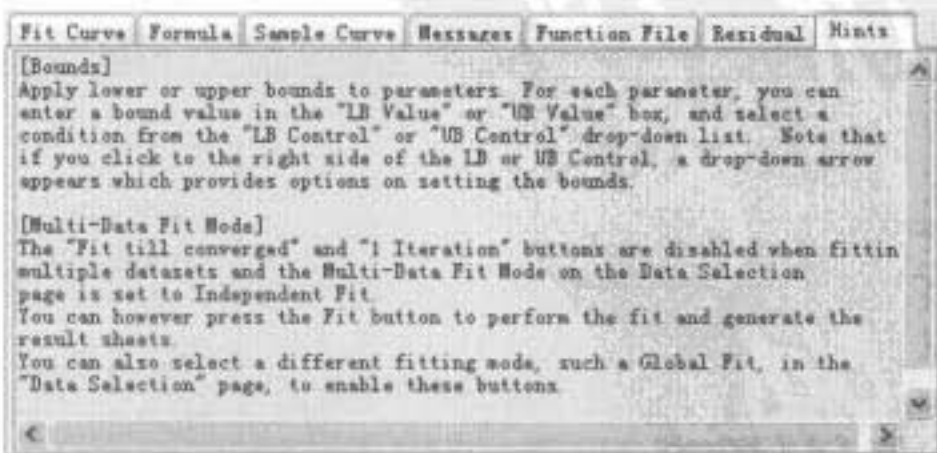
(9) Function File: 一些关于该拟合函数的信息。



(10) Residual: 残留分析图形预览。



(11) Hints: 一些使用的小提示。



7.3.3 自定义函数拟合

Origin 中已经提供了超过 200 种函数，然而科学是无止境的，我们经常会发现自己的拟

合函数并不存在于 Origin 中,这样的话就要自定义函数。

关于自定义函数拟合,有一点是要思考的,即自定义的函数基本上是预先确定的,这些函数要么来源于文献中的模型,要么是自己通过数学运算推导出来的,因此拟合结果(参数)必然具有一定的物理意义,其结果可以加以解释,否则如果胡乱使用一种数学函数,即使拟合结果非常好,可以说也是毫无意义的。


下面以一下实例来介绍用户自定义函数拟合的过程:

(1) 首先打开 Tools 菜单中的 Fitting Functions Organizer 拟合函数管理器。在 User Defined 用户自定义下面建立目录和函数。单击 New Category 建立目录“MyFuncs”,然后再单击 New Function 将自定义函数命名为“MyExp”,以上两个名称直接输入到文本框中。

(2) 现在进行最重要的工作,即构建函数。一个函数关系是由自变量、因变量和相关常量构成的,常量在这里称为参数 Parameter,事实上曲线拟合就是为了求得这些参数的最佳合理值,在拟合之前这些参数是未知的,因此也要使用各种代码来表示。对于本实例来说,保持 Independent Variables (自变量)是为 x , Dependent Variables (因变量)为 y 不变,拟合时这些 x 和 y 对应着源数据的记录,Parameter Names 参数名称则修改为 $y0,a,b$ 即共有 3 个参数。为了帮助用户正确地完成自定义函数的工作,当将鼠标单击到相应输入框时,在对话框最下面的 Hints 中会有进一步的提示,如图 7.17 鼠标停留在 Parameter Names, Hints 框中告诉我们如何命名参数名称等。



图 7.17 使用拟合函数管理器建立自定义目录和函数

(3) 完成了函数定义后,为了能够在 Origin 中进行使用,必须经过代码编译,编译后自定义函数就与内部函数一样成为系统的一部分。单击  调用 Coder Builder 进行编译。可以看

到系统自动将我们刚刚定义的函数编译成 C 语言代码。不要管这些代码，而是直接单击 Compile 编译，可以看到左下角出现编译和链接状态提示，当看到 Done 即完成了编译工作，单击 Return to Dialog 返回自定义函数对话框，如图 7.18 所示。

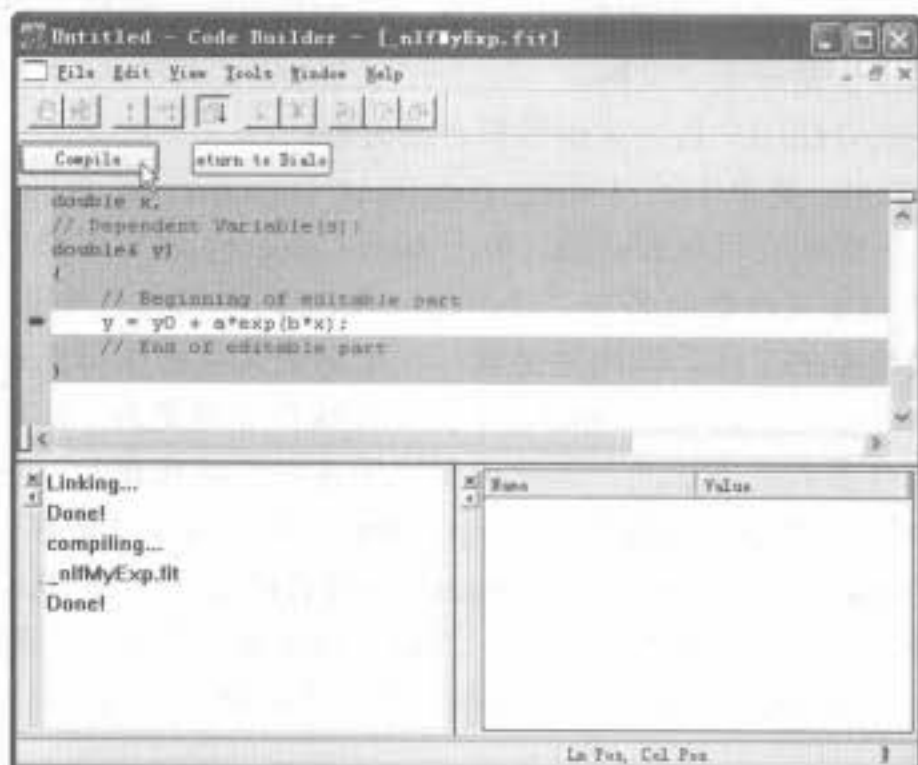


图 7.18 代码编译

单击 Save 保存按钮进行保存，可以单击 Simulate 对函数进行模拟，最后单击 OK 按钮回到 Origin 主界面，完成了自定义函数的工作，如图 7.19 所示。

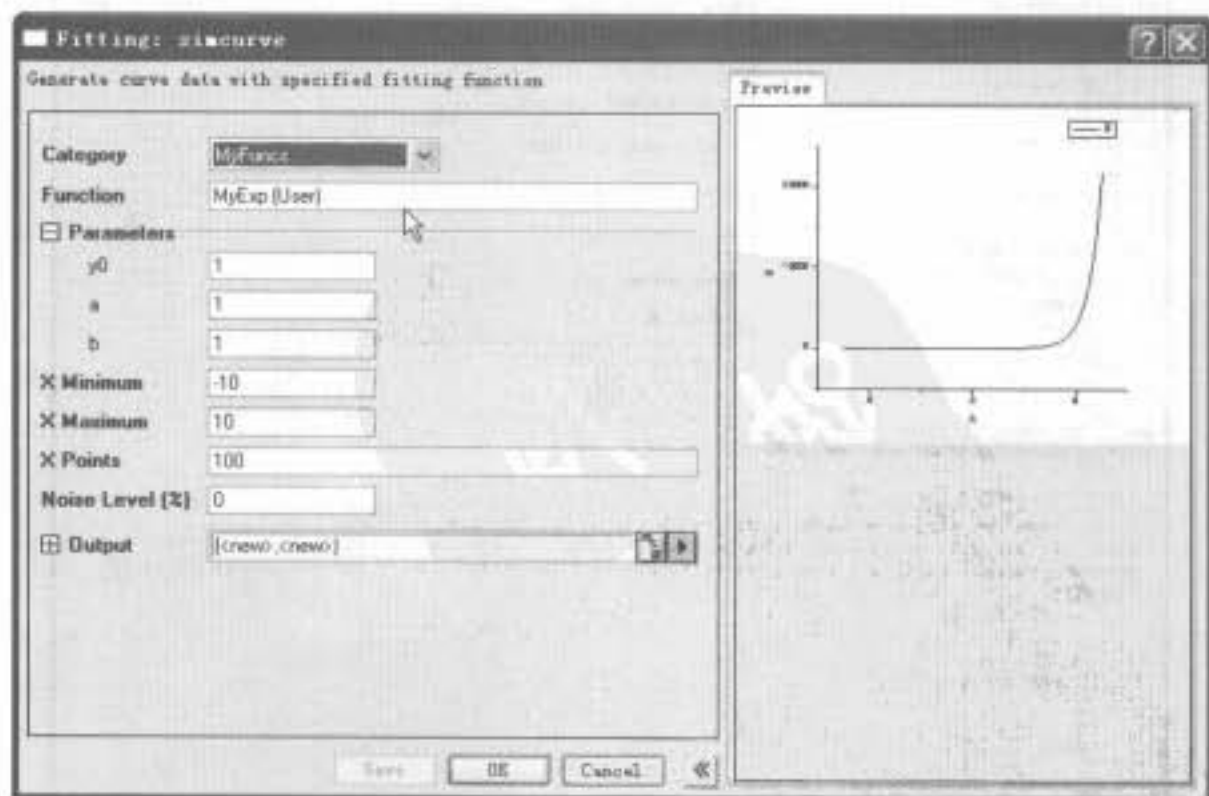


图 7.19 自定义函数的基本曲线图

(4) 使用自定义函数进行拟合：导入 C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Curve Fitting 目录下的 Exponential Decay.dat 文件，选择 B 列作散点图，使用与内部拟合函数一样的方法打开 Nonlinear Curve Fit 对话框，选择 MyFuncs 目录的 MyExp 函数进行拟合。

(5) 为了得到有效的结果和减少处理工作量, 必须单击 **Parameters** 进行参数设置, 在这里我们输入自定义的 3 个参数的初始值, 都定义为 1。然后单击鼠标所指的按钮 **Fit Till Converged** 即拟合直到数据收敛, 完成收敛后即可得到 y_0 , a 和 b 的值, 单击 **OK** 按钮返回主界面, 完成拟合。结果如图所示, 表格显示了自定义函数方程式、三个参数以及相关系数 R^2 的数值, $R^2=0.985$ 表示拟合情况良好, 将 y_0 , a 和 b 三个数值代入函数方程式即可得到最终的方程, 如图 7.20 和图 7.21 所示。

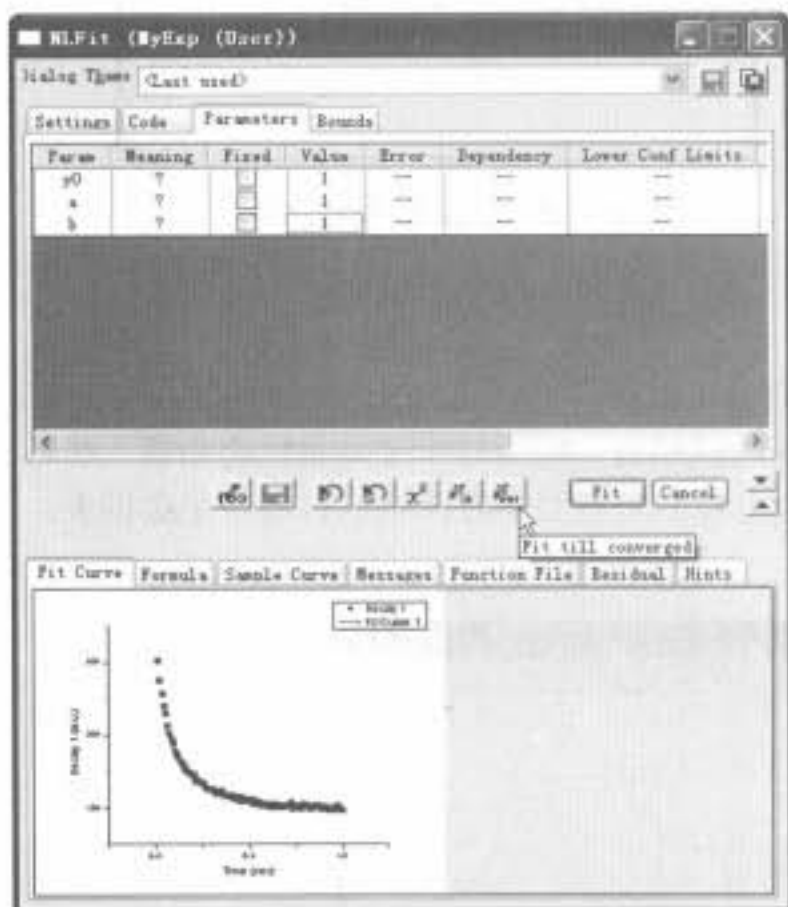


图 7.20 使用自定义函数进行拟合

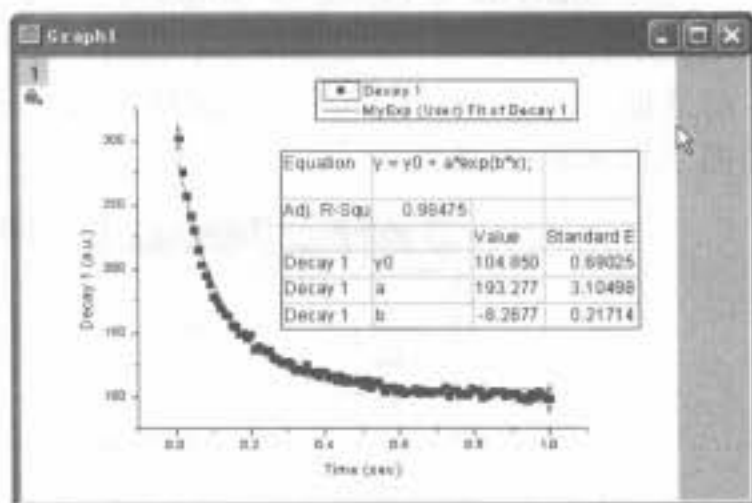


图 7.21 自定义函数拟合结果

要说明的是, 自定义函数一旦建立和编译成功, 以后就无需再次建立, 而是当成内部函数一样使用, 也即导入数据, 调用非线性拟合对话框即可完成拟合工作。

7.3.4 Nonlinear Surface Fit、Fit Single Peak、Fit Exponential、Fit Sigmoidal

这 4 种拟合方式对应的命令分别为 **Analysis → Fitting → Nonlinear Surface Fit...**、**Analysis → Fitting → Fit Single Peak...**、**Analysis → Fitting → Fit Exponential...** 和 **Analysis → Fitting → Fit Sigmoidal...**, 其使用方法都是通过 **NLFit** 对话框设置、生成拟合结果, 其中的区别只是拟合函数的不同而已。

7.3.5 Fit Multi-peak

通过 **Analysis → Fitting → Fit Multi-peak...** 命令可以对数据进行多峰值拟合。

首先导入 **C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Curve Fitting\Multiple Peaks.dat**, 然后生成数据的曲线图, 再通过 **Analysis → Fitting → Fit Multi-peak...** 命令打开 **Fitting:fitpeaks** 对话框, 设置好 **Peak Type** (拟合方法)、**Number of Peaks** (峰数目) 以及输入输出等参数后单击 **OK** 按钮, 然后在数据的 **Graph** 上寻找指定数目的峰值, 寻找完毕之后便会输出峰值拟合结果了, 如图 7.22 和图 7.23 所示。



图 7.22 多峰拟合

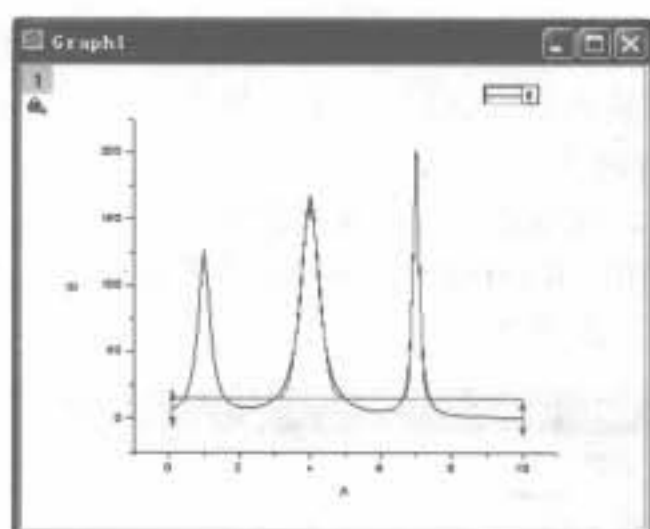


图 7.23 拟合两个峰的结果

7.3.6 Simulate Curve

通过 Analysis → Fitting → Simulate Curve... 命令可以打开 Fitting:simcurve 对话框。这个工具看起来与 NLFit 的相关设置基本相同，不过其功能相反，因为这个工具是先有曲线，然后才有数据，即通过一定的函数（选择目录、函数名称）和相关参数，然后自动产生数据表，如图 7.24 和图 7.25 所示。

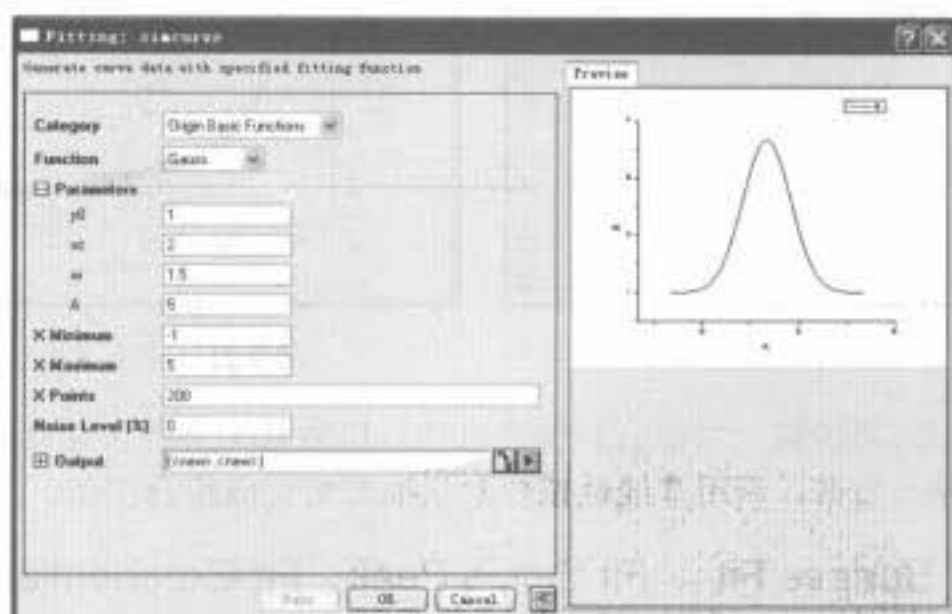


图 7.24 模拟曲线

Long Name	X of simcur	simcurve
Units		
Comments		
1	-1	1.00089
2	-0.96995	1.00105
3	-0.9397	1.00123
4	-0.90955	1.00143
5	-0.8794	1.00168
6	-0.84925	1.00195
7	-0.8191	1.00227
8	-0.78894	1.00264
9	-0.75878	1.00307
10	-0.72864	1.00355
11	-0.69849	1.00411
12	-0.66834	1.00474

图 7.25 利用函数生成数据

本章要点

- 插值和外推
- 简单数学运算
- 微分和积分
- 曲线运算

8.1 数学运算概述

数学处理主要包括插值和外推、简单数学运算、微分和积分、曲线平均等。这些分析都可以通过 Analysis → Mathematics 菜单选择相应指令进行操作。只要打开对话框,设置好参数,单击 OK 即可在指定的位置输出结果,如图 8.1 所示。

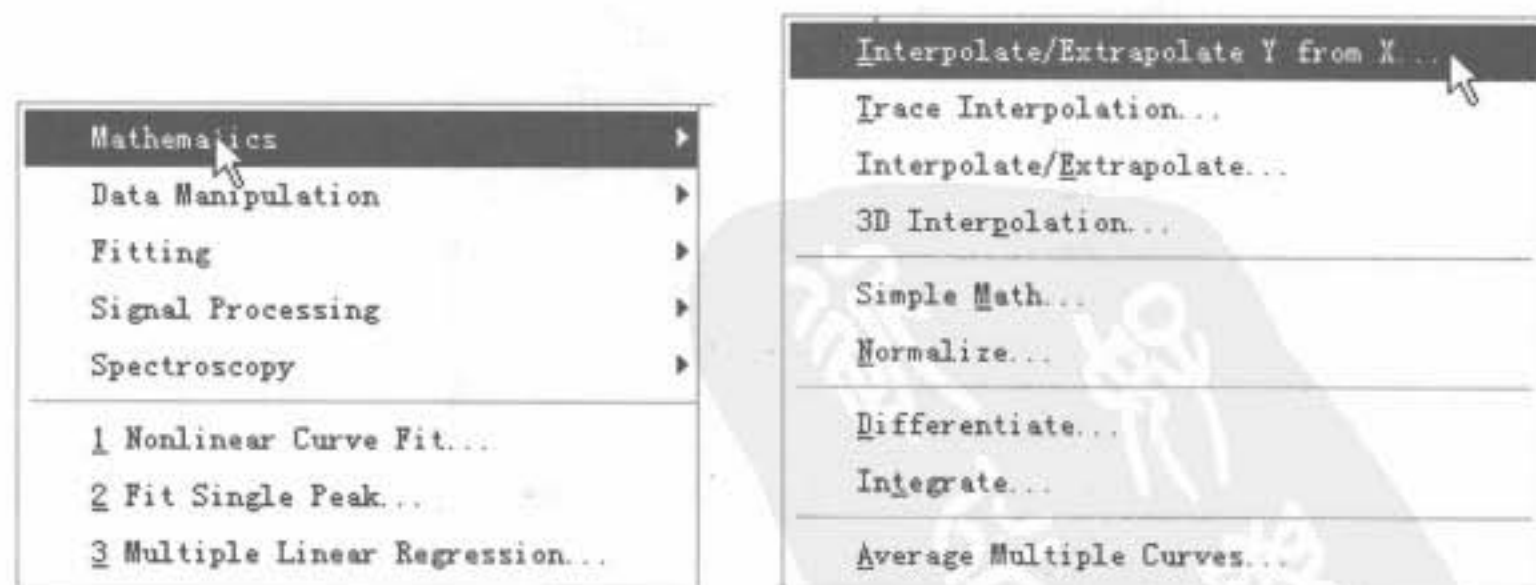


图 8.1 Mathematics 菜单

这些数据运算可以在数据表中进行,也可以在图形窗口中进行,两者的算法选项略有差异。如果是在 Graph 图形窗口中进行,则可以即时看到处理结果的曲线。

而在对话框标题上的,则是相应 X-Function 的名字,因此也可以通过 Command Window 来执行。

8.2 数据运算实例

8.2.1 Interpolate/Extrapolate Y from X... 插值/外推求 Y 值

利用 Interpolate/Extrapolate Y from X... 命令可以进行外推/插值操作。所谓插值，指的是在已有的数据点之间尽量按照数据原有趋势增加一些数据点、所谓外推，指的是在当前曲线之外按照曲线末端走向，增加一些数据点。增加数据点的依据是原有的数据趋势，可以有多种算法进行选择，实质是根据一定的算法找到新的 X 坐标对应的 Y 值。

本功能在 Worksheet 中操作，可以根据原数据的趋势，再根据设定的 X 值，计算出合适的 Y 值。其参数设置为：

- (1) X Values to Interpolate: 指定 X 值范围用于插值；
- (2) Input: 要处理的数据区域；
- (3) Method: 分析算法，包括 Linear (线性)、Cubic Spline (三次样条插值)、Cubic B-Spline (B 样条插值)；
- (4) Result of interpolation: 插值结果输出区域；
- (5) Recalculate: 设置输入数据与输出数据的连接关系 (即是否因原数据的改变而重新计算)，包括 Auto (自动)、Manual (手动)、None (不连接) 3 个选项。

实例：导入 C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Mathematics 下的 Interpolation.dat 数据文件。新建 D 列和 E 列，在 D 列输入一系列的 X 值，E 列用于输出结果。然后选中 A 列和 B 列，调用 Interpolate/Extrapolate Y from X 命令，出现对话框如图 8.2 所示。

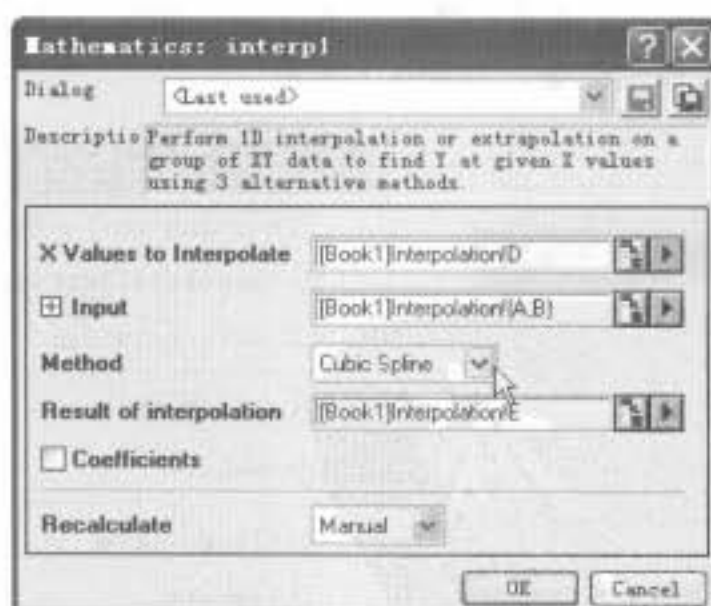


图 8.2 插值对话框

Input 会自动生成，即 A 列和 B 列，将 X Value to Interpolate 设定为 D 列，将 Result of Interpolation 设定为 E 列，Method 设定为 Cubic Spline，单击 OK 按钮。这样设置的目的是根据 A 列(X)和 B 列(Y)的数据趋势，再根据 D 列的 X 值，插值的结果输出到 E 列，结果 Worksheet 如图 8.3 所示。



提示 本例只是为了说明方便，才新建立 D 列和 E 列用于进行插值演示，实际的情况下可以在 A 列追加输入新的 X 数据，然后直接输出到对应的 B 列即可。

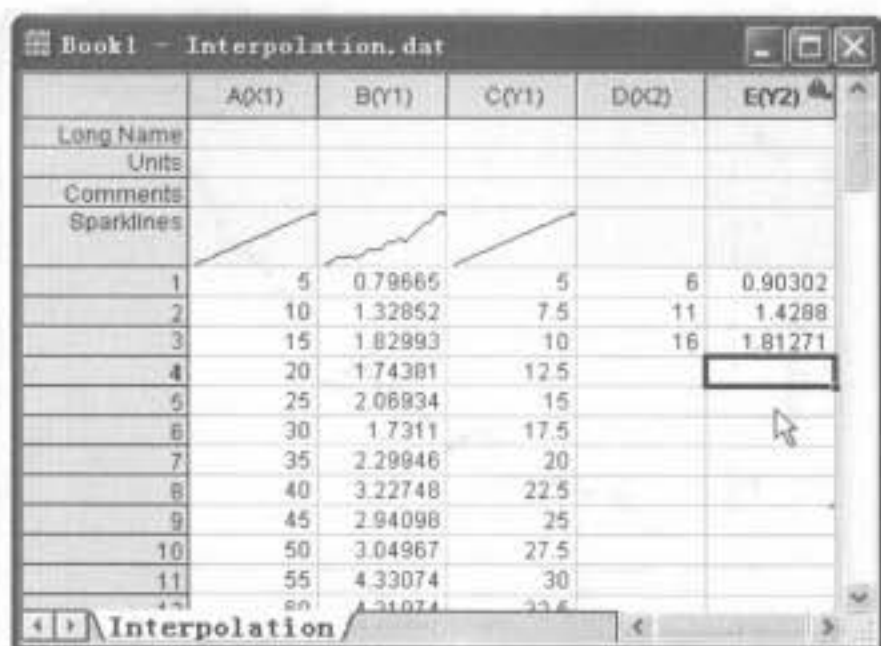


图 8.3 插值结果

8.2.2 Trace Interpolation... 趋势插值

利用 Trace Interpolation...命令可以进行趋势插值操作，适用于工作表或图形窗口。利用这个功能，在原有曲线中均匀地插入 n 个数据点，默认是 100 个点。

- (1) Input: 输入数据区域;
- (2) Method: 分析算法, 包括 Linear (线性)、Cubic Spline (三次样条插值)、Cubic B-Spline (B 样条插值);
- (3) Number of Points: 插值点数目;
- (4) Output: 插值结果输出区域;
- (5) Recalculate: 设置输入数据与输出数据的连接关系, 包括 Auto (自动)、Manual (手动)、None (不连接) 3 个选项。

实例: 数据文件同 8.2.1, 选中 A 和 B 列作散点图, 然后调用 Trace Interpolation, 并设置如图 8.4 所示。

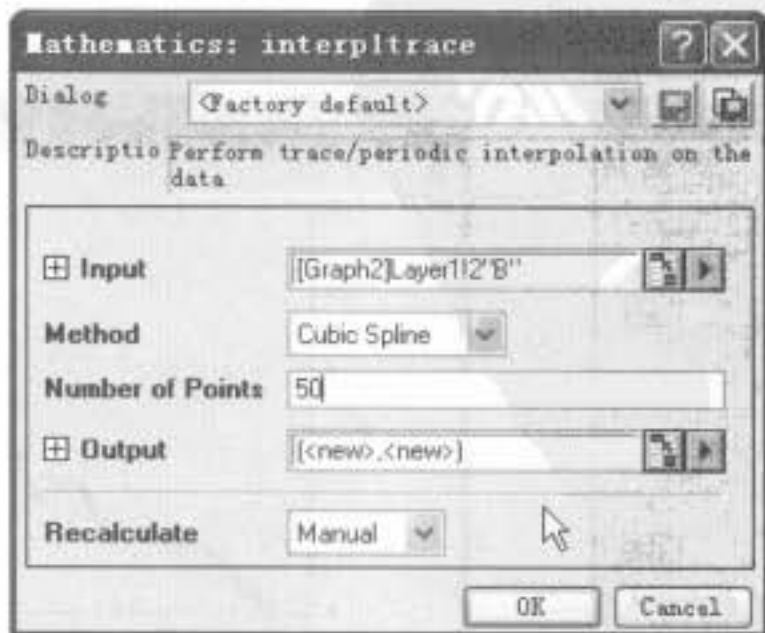


图 8.4 趋势插值

则结果如图 8.5 所示, 其中空心点为原有数据点, 红色实心点为插值产生的数据点。

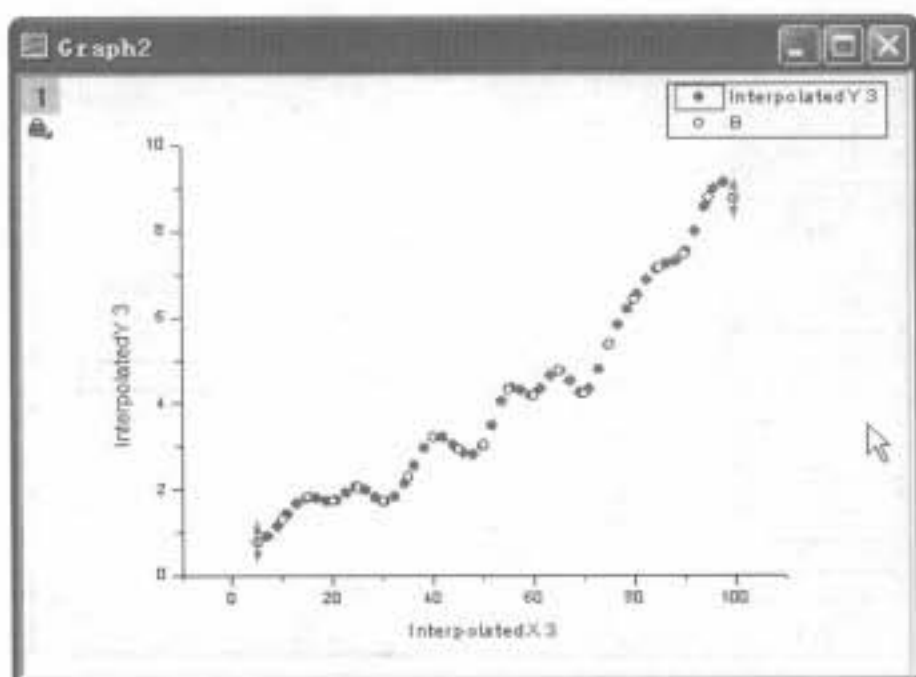


图 8.5 插值结果

8.2.3 Interpolate/Extrapolate... 插值/外推

利用 Interpolate/Extrapolate... 命令可以进行外推/插值操作, 利用这个功能可以设定一个较大的范围(超过原有 X 坐标范围)均匀插入 n 个点。其中的参数设置为:

- (1) Input: 输入数据区域;
- (2) Method: 分析方法, 包括 Linear (线性)、Cubic Spline (三次样条插值)、Cubic B-Spline (B 样条插值);
- (3) X Minimum/X Maximum: 最小/最大插值点;
- (4) Output: 插值结果输出区域;
- (5) Recalculate: 设置输入数据与输出数据的连接关系, 包括 Auto (自动)、Manual (手动)、None (不连接) 3 个选项。

实例: 仍然使用 8.2.1 的数据文件, 作 A 和 B 列的散点图, 调用 Interpolate/Extrapolate, 要实现外推最重要的是在对话框中将 X Minimum 和 X Maximum 的数值重新设定, 让 X 值的范围超过原有范围, 结果如图 8.6 和图 8.7 所示。



图 8.6 外推参数设置

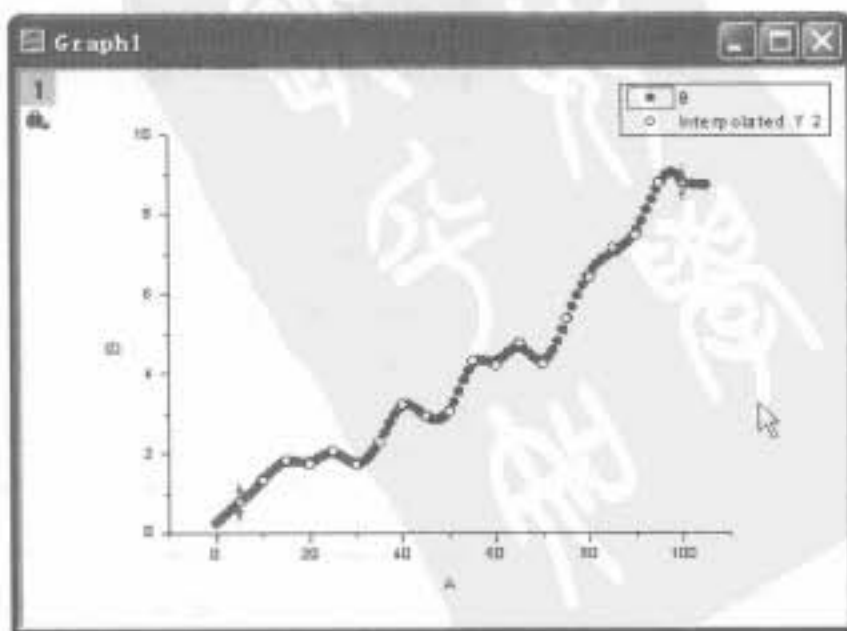


图 8.7 外推结果

8.2.4 3D Interploation... 3D 插值

利用 3D Interploation...命令可以进行 3D 数据进行外推/插值操作,其中的参数设置如图 8.8 所示。

- (1) Input: 输入数据区域;
- (2) Number of Points in Each Dimension: 各个方向上的最大/最小插值点;
- (3) Output: 插值结果输出区域;
- (4) Recalculate: 设置输入数据与输出数据的连接关系,包括 Auto(自动)、Manual(手动)、None(不连接) 3 个选项。

8.2.5 Simple Math... 简单数学运算

利用 Simple Math...命令可以进行普通的数学运算,适用于数据表或图形。利用这个功能可以非常方便地对数据或曲线进行简单的加减乘法的运算,对于图形来说,可以利用加减运算进行平移或升降,利用乘除可以调整曲线的纵横深度。在实际使用中,这个功能是非常有用的,特别是当对多条曲线进行比较时。

实例:导入 C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Curve Fitting 目录下的 Multiple Peaks.dat 文件,选中所有列作线图,结果如图 8.9 所示。

可以发现所有曲线重叠在一起,不方便观察和描述,调用 Simple Math 命令出现如图 8.10 所示对话框。



图 8.8 3D 插值参数设置

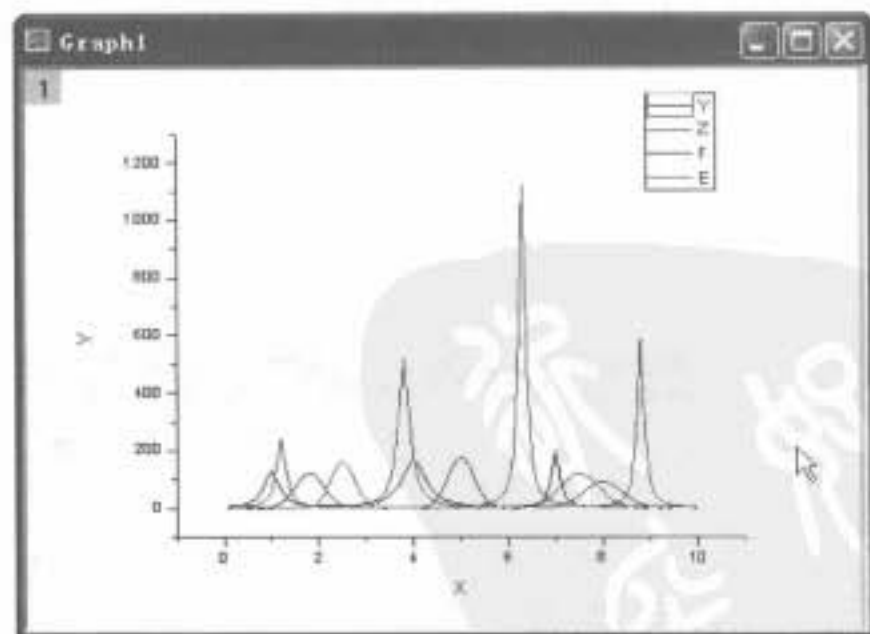


图 8.9 原图



图 8.10 Simple Math 对话框

其中的参数设置为:

- (1) Input: 输入数据区域;
- (2) Operator: 操作符,包括加、减、乘、除和幂操作;
- (3) Operand: 操作数类型,包括常量和参数数据(如用于扣除背景);
- (4) Reference Data: 使用数据集作为操作数;
- (5) Const: 使用常量作为操作数;

(6) Output: 结果输出区域;

(7) Recalculate: 设置输入数据与输出数据的连接关系, 包括 Auto (自动)、Manual (手动)、None (不连接) 3 个选项。

通过观察原来曲线的数据, 并用加减操作调整四条曲线的数值, 结果如图 8.11 所示。

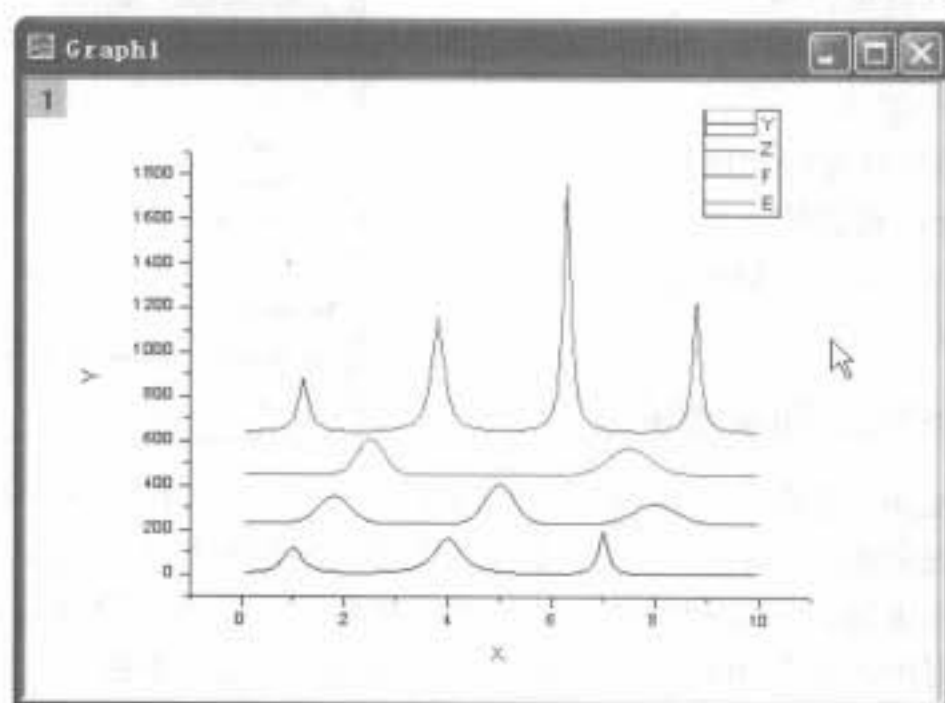


图 8.11 通过数据运算平衡曲线

8.2.6 Normalize... 规范化/常态化

在 Graph 图形窗口的情况下, 利用 Normalize... 命令对曲线进行规范化操作, 主要目的是将数值除以一个值以便产生新的结果, 其中的参数设置如图 8.12 所示。

(1) Input: 输入数据区域。

(2) Data Info: 输入数据信息。

(3) Normalize Methods: 规格化方法。

1) Divided by a specified value: 除以一个值;

2) Normalize to [0, 1]: 使数据出现在 0~1 区间;

3) Transfer to N(0, 1): 转换为 0~1 区间的正

态分布;

4) Divided by Max;

5) Divided by Min;

6) Divided by Mean;

7) Divided by Median;

8) Divided by SD;

9) Divided by Norm;

10) Divided by Mode。

(4) Output: 结果输出区域。

(5) Recalculate: 设置输入数据与输出数据的连接关系, 包括 Auto (自动)、Manual (手动)、None (不连接) 3 个选项。

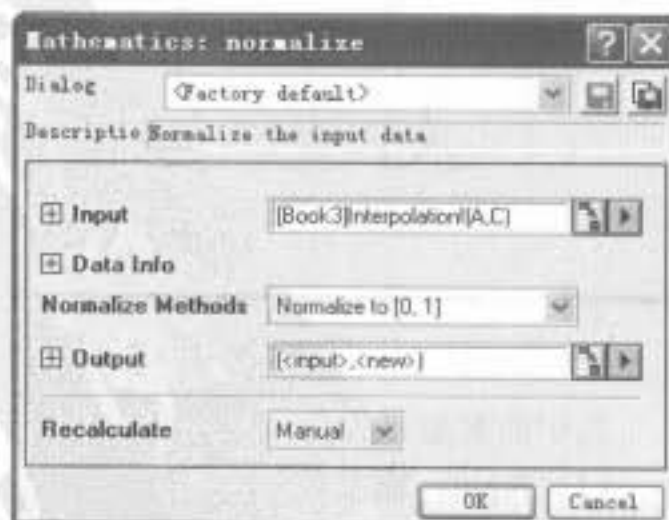


图 8.12 规范化对话框

8.2.7 Differentiate...微分

利用 Differentiate...命令可以对数据进行微分操作，其中的参数设置如图 8.13 所示。

- (1) Input: 输入数据区域;
- (2) Derivative Order: 阶数;
- (3) Output: 结果输出区域;
- (4) Plot Derivative Curve: 是否生成图形;
- (5) Recalculate: 设置输入数据与输出数据的连接关系, 包括 Auto (自动)、Manual (手动)、None (不连接) 3 个选项。

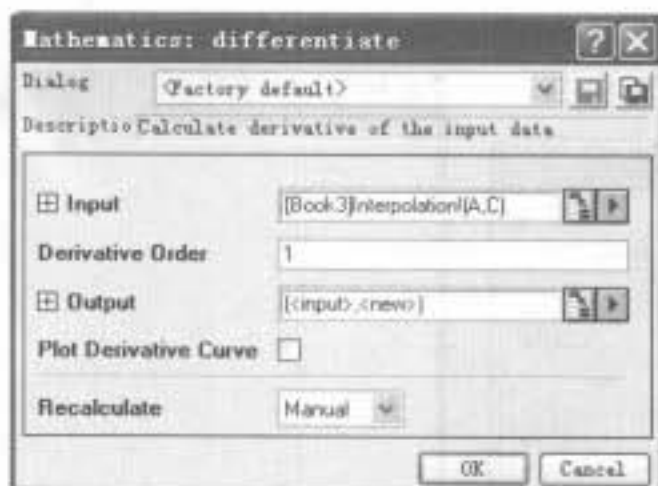


图 8.13 微分处理

8.2.8 Integrate... 积分

利用 Integrate...命令可以对数据进行积分操作，其中的参数设置如图 8.14 所示。

- (1) Input: 输入数据区域;
- (2) Area Type: 进行积分的方式;
- (3) Output: 结果输出区域;
- (4) Plot Integral Curve: 是否生成计算结果的数据图形;
- (5) Results Log Output: 是否输出计算结果到 Results Log 窗口;
- (6) Recalculate: 设置输入数据与输出数据的连接关系, 包括 Auto (自动)、Manual (手动)、None (不连接) 3 个选项。

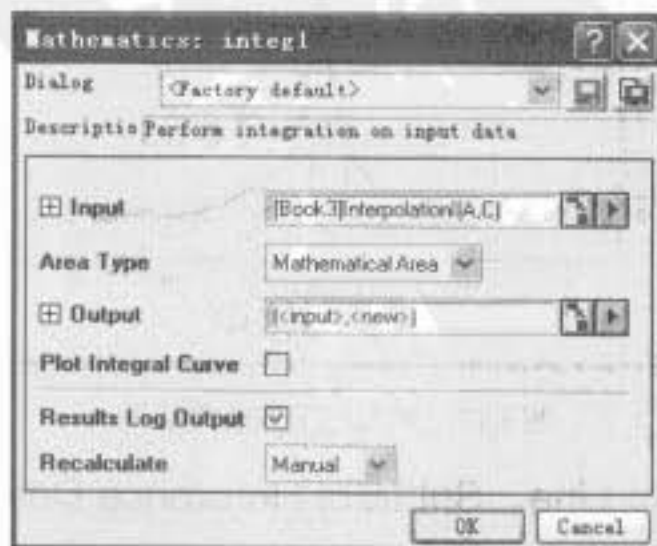


图 8.14 积分处理

8.2.9 Average Multiple Curves... 平均多条曲线

对于 X 单调上升或下降的数据, 可以利用 Average Multiple Curves... 命令可以对两条曲线进行平均化操作, 其中的参数设置如图 8.15~图 8.17 所示。

(1) Input: 输入数据区域;

(2) Method: 操作方法;

(3) Output: 结果输出区域;

(4) Additional Output: 是否显示一些输出结果项;

(5) Recalculate: 设置输入数据与输出数据的连接关系, 包括 Auto (自动)、Manual (手动)、None (不连接) 3 个选项。

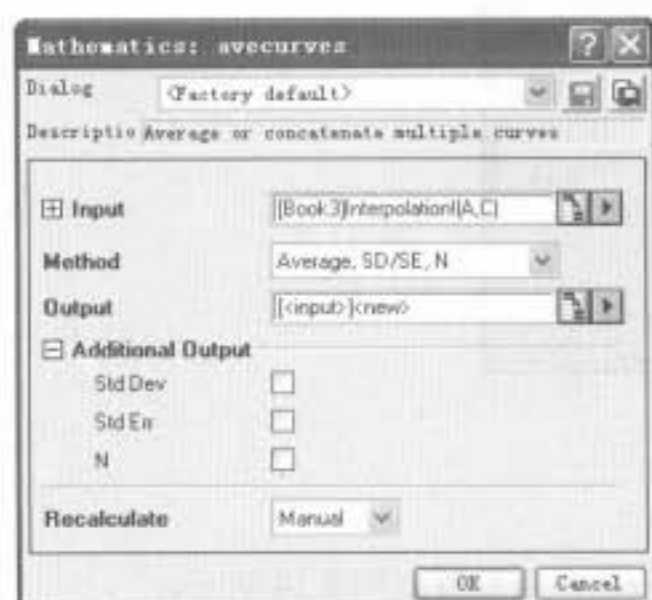


图 8.15 平均多条曲线

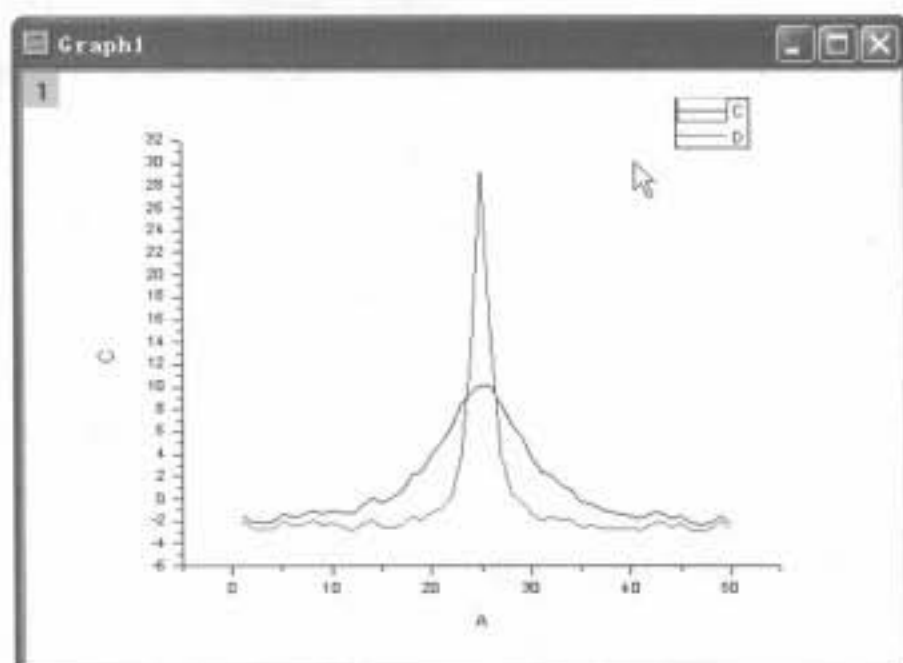


图 8.16 原图

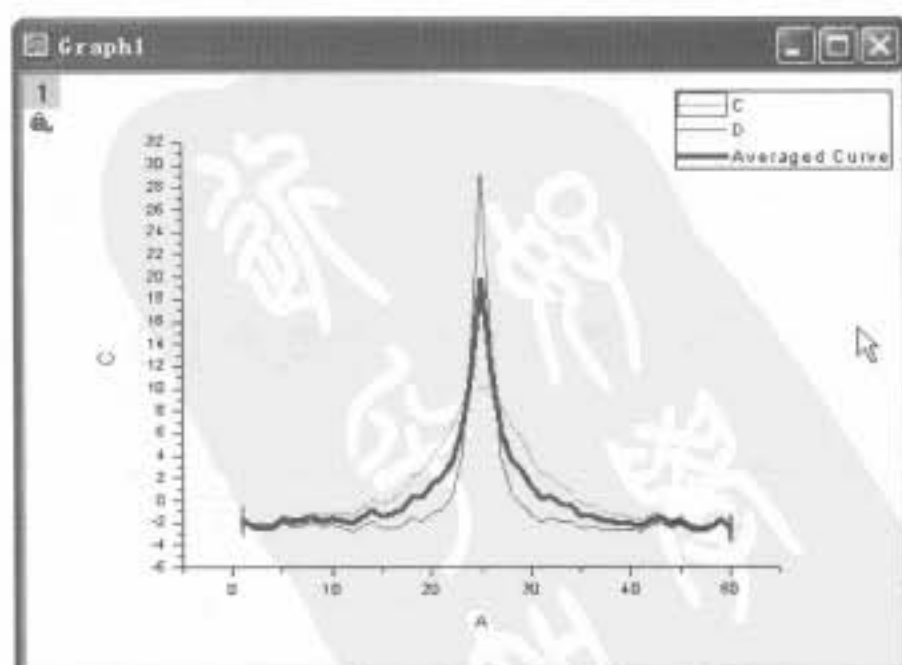


图 8.17 平均两条曲线的结果

8.2.10 Subtract Straight Line、Subtract Reference Data 扣除数据

这两个命令位于 Analysis → Data Manipulation 菜单中, 目的是为了进行数据扣除运算,

两个命令的主要区别是, Subtract Reference Data 用于扣除一系列已经存在的数据, 因此主要用于扣除空白实验数据 (即背景或基底), 可用于 Worksheet 或 Graph, 而 Subtract Straight Line 则直接通过扣除一条由绘制的直线 (不一定是水平线, 也可以是斜线), 当原有数据随实验过程明显偏移基线时可人为地进行修正。以下 Subtract Straight Line 为例进行说明。

实例: 导入 C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Spectroscopy\Raman Baseline.dat 文件, 选中 B 列作线图, 结果如图 8.18 所示。

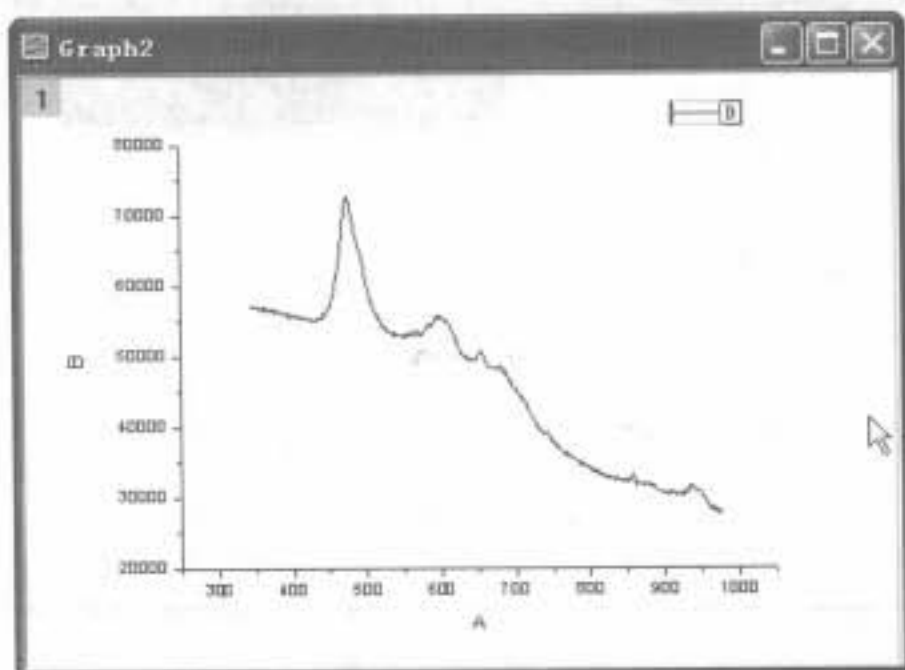


图 8.18 原图

调用 Analysis → Data Manipulation → Subtract Straight Line 菜单命令, 通过鼠标双击确定起点终点, 绘制一条斜线用于扣除, 则结果如图 8.19 所示。

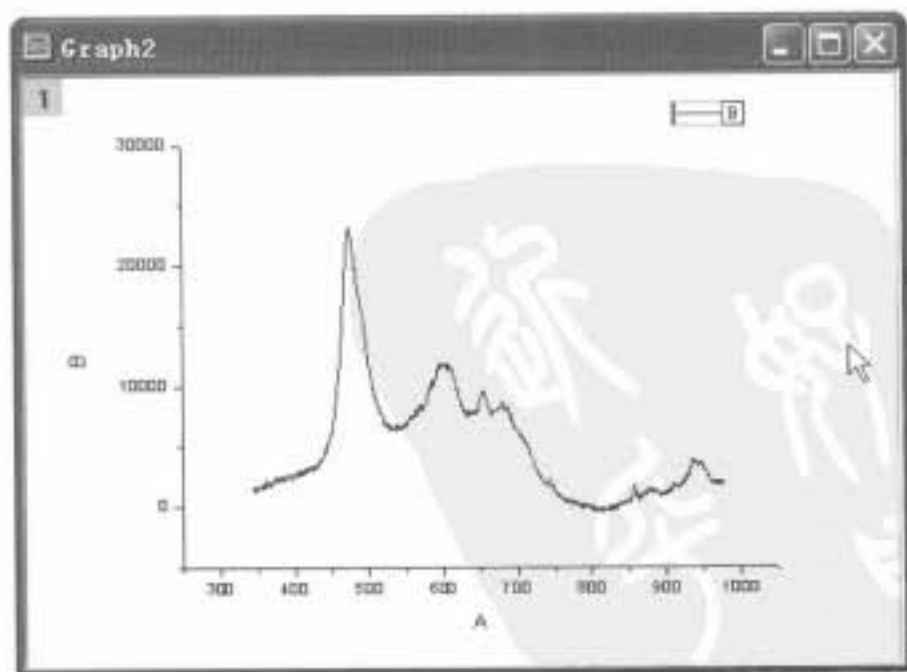


图 8.19 扣除斜线的结果

8.2.11 Vertical Translate、Horizontal Translate 平移曲线

这两个命令位于 Analysis → Data Manipulation → Translate 菜单中, 目的是为了对当前曲线进行平移, 两者的差别是 Vertical Translate 实现垂直移动, 而 Horizontal Translate 实现水平

移动。

仍然使用 8.2.10 的数据和图形，使用 Vertical Translate 命令，出现红色水平线，通过鼠标控制，让曲线整体向下移动，最后得到结果。

注意图形形状并不改变，改变的是 Y 轴坐标，Data Display 中 dy 显示出本次垂直移动的相对位移值，如图 8.20 所示。

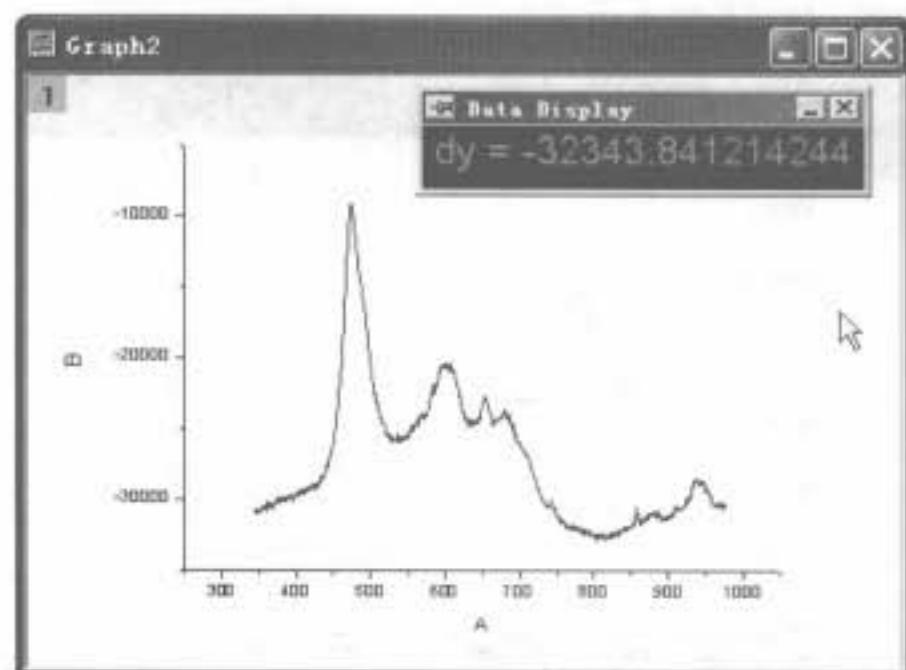


图 8.20 平移曲线

本章要点

- 平滑
- 滤波
- 傅里叶变换
- 小波变换

9.1 信号处理概述

9.1.1 数字信号与信号处理

信号是一种物理体现或物理属性，这些物理属性是可以检测的，如电压，压力，温度、浓度、频率、波数等。信号可分为模拟信号和数字信号，通常模拟信号是持续变化的，而数字信号是离散的。数字信号可用一系列二进制码形式的数表示。对于计算机来说，它能处理的信号当然是数字信号。

DSP (digital signal processing, 数字信号处理) 是利用数字计算机或专用数字硬件、对数字信号所进行的一切变换或按预定规则所进行的一切加工处理运算，例如，滤波、检测、滤波、变换、增强、估计、识别、参数提取、频谱分析等，达到提取有用信息便于应用的目的。

模拟信号与数字信号可以通过 A/D (模拟转数字) 或 D/A (数字转模拟) 设备进行转换。目前大部分仪器的所谓“计算机接口”或“计算机编程支持”就是增加了这一变换模块，简单来说，大部分仪器得到的结果是模拟信号，而计算机从接口处得到的是数字信号。

广义上来说，数字信号处理涉及的应用非常广泛：例如实验仪器的频谱分析、生物医学信号处理、雷达信号处理、数字通信、自动化控制、语音辨识和编码、图像压缩和 3D 变换、视频电话信号压缩等。

数字信号处理是一门建立在微积分、概率统计、随机过程、高等数学、数值分析、积分变换、复变函数等基础上的应用数学课程，主要应用于物理和通信。读者如果希望能够深入了解，请参考相关书籍，如果只是追求应用，则要注意使用方法和输入输出参数的物理意义即可。当然，像傅里叶变换和小波变换这样的快速处理算法，即使搞不明白其内涵，也要明白其在应用数学方面的革命性成就。

9.1.2 Origin 信号处理

在 Origin 中, 信号处理部分涉及的内容主要为: ①平滑, 即使信号变化更加平滑, 作用之一是除噪; ②滤波, 即信号过滤; ③傅里叶变换 (Fourier transforms), 频谱分析、滤波、卷积、反卷积与相关运算等操作; ④小波变换 (Wavelet transforms), 分解、重构、除噪、平滑等, 如图 9.1 所示。



图 9.1 信号处理相关菜单命令

关于图像信号处理, 则有大量专门的算法, 将在后面章节进行介绍。

9.2 平滑和滤波

9.2.1 平滑

平滑是通过对一系列相邻数据点的平均, 从而使信号曲线变化更加平滑。

要对数据进行平滑操作, 可以先通过 File → Import 命令导入数据, 这里以 C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Signal Processing\EPR Spectra.dat 为例, 选 B 列作线型图, 如图 9.2 所示。

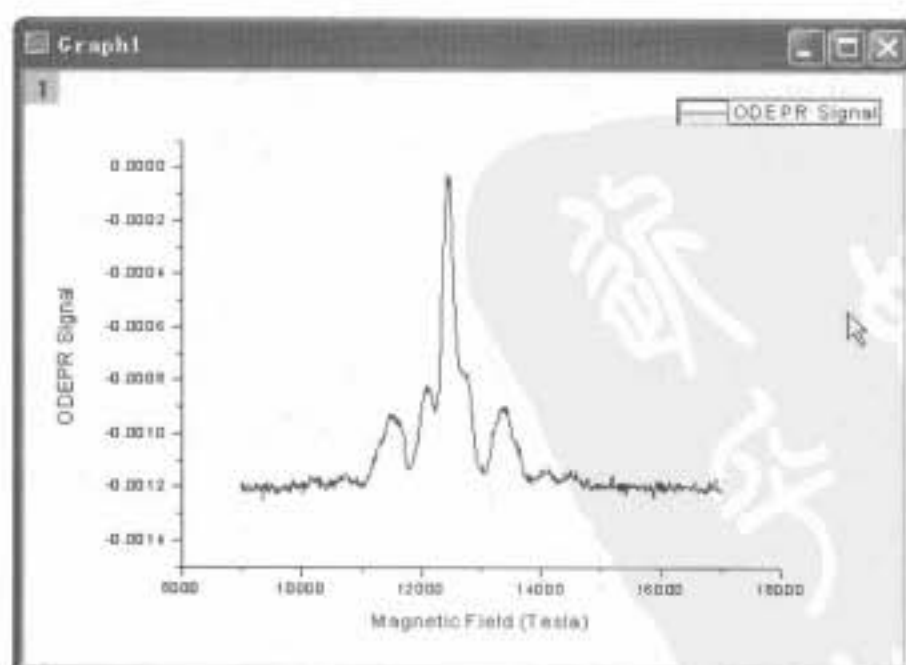


图 9.2 原图

通过 Analysis → Signal Processing → Smoothing 命令打开 smooth 对话框, 如图 9.3 所示。

对话框左边是一个设置框, 只要设置好参数, 单击 Preview 按钮即可在右边的预览窗口生成预览图, 也可以选中 Auto Preview 以便自动预览。

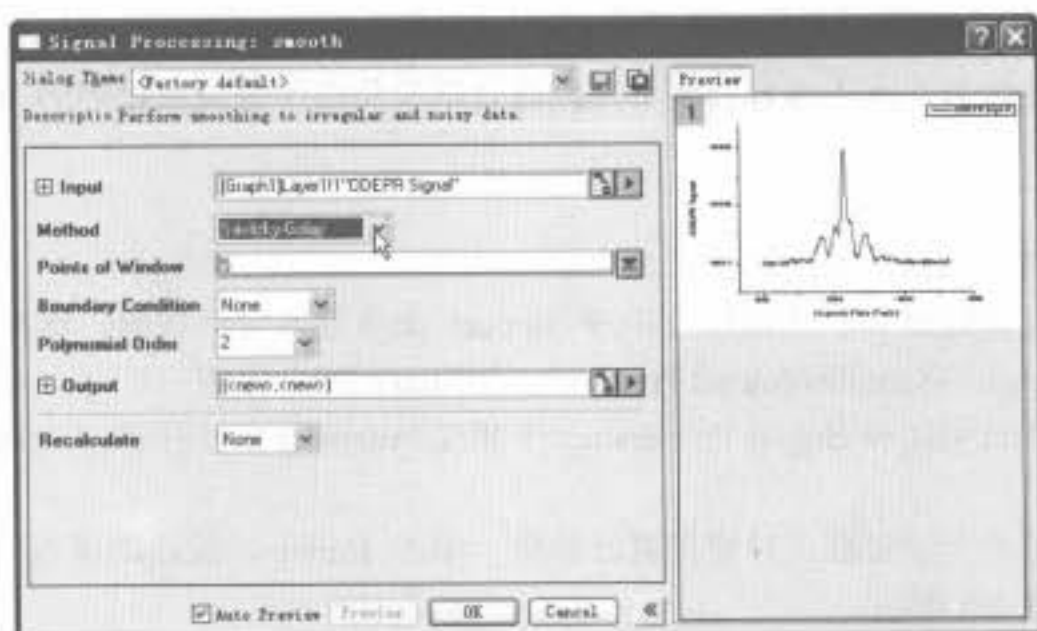


图 9.3 平滑对话框

在设置框里面，可以设置的除了有 Input、Output 以及 Recalculate 等常见的设置项之外，还有 Method(平滑方法)：包括 Adjacent-Averaging、Savitzky-Golay、Percentile Filter 和 FFT Filter 4 种方法，每种方法对应的处理效果和相关参数略有不同。

Points of Window：平滑曲线的点数，点数越大平滑效果越小，数据失真越严重，一般设置为 5~11 个点，当然，数据点很多时，这个值可以大一些。

Polynomial Order：设置在 Savitzky-Golay 方法下的多项式项数。

Weighted Average：设置 Adjacent-Averaging 方法时是否使用加权平均。

Percentile：设置在 Percentile Filter 方法下平滑曲线的垂直距离的百分点。

Cutoff Percentage：设置在 FFT Filter 方法下平滑曲线的偏移百分点。

Boundary Condition：边界条件，包括 None、Reflect、Repeat、Periodic 和 Extrapolate 5 个选项；

为了表现平滑的效果，Points of Window 参数设置为 100。完成设置后单击 OK 则完成分析并输出结果，如图 9.4 所示。

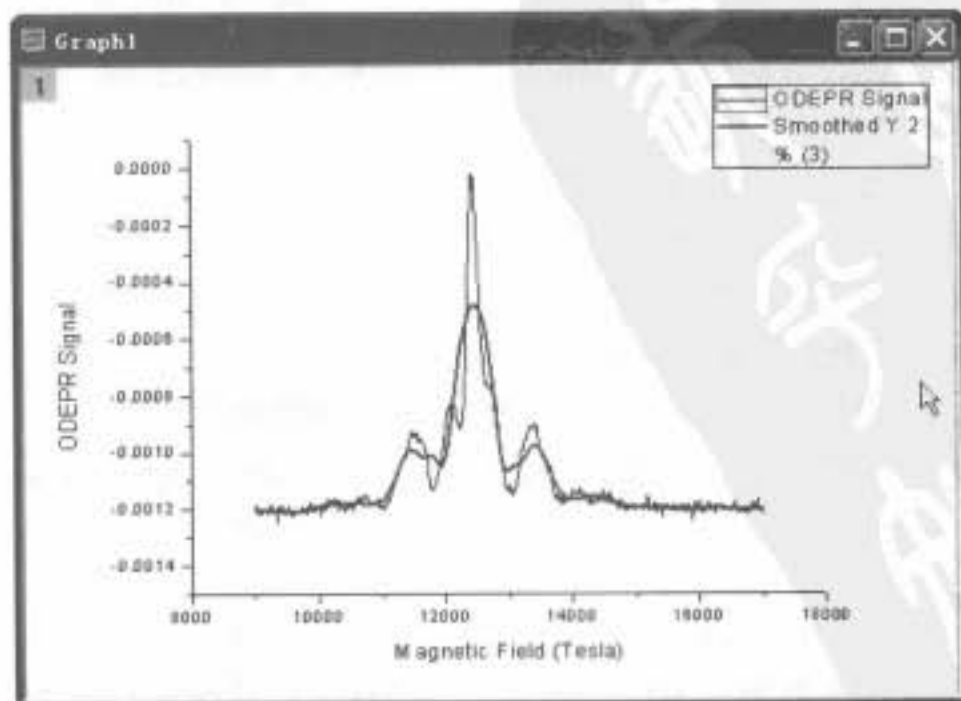


图 9.4 平滑结果

当然，本例只是为了显示平滑的效果，因此结果比较夸张。实际操作中，平滑的点数不能太多，平滑点数越多，结果越容易失真，因此具体操作以不影响数据趋势为准。

9.2.2 滤波

滤波当然指的是对信号的过滤工作。

要对数据进行滤波操作，先通过 File → Import 命令导入分析数据，这里以 C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Signal Processing\fftfilter1.DAT 为例。

然后，通过 Analysis → Signal Processing → FFT Filters 命令打开 fft_filters 对话框，如图 9.5 所示。

对话框左边是一个设置框，只要设置好参数，单击 Preview 按钮即可在右边的预览窗口生成预览图，如图 9.6 所示。



图 9.5 滤波对话框

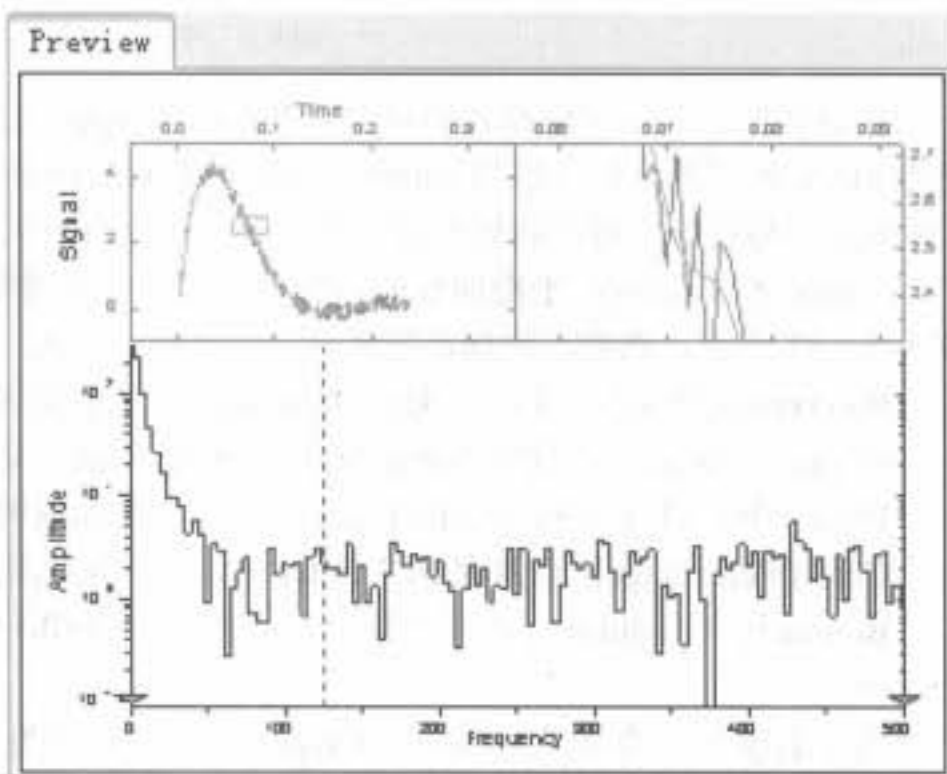


图 9.6 预览窗口

在设置框里面，可以设置的除了有 Input、Output 以及 Recalculate 等常见的设置项之外，最重要的是 Filter Type（分析方法）：

- (1) Low Pass: 只允许低频率部分保留；
- (2) High Pass: 只允许高频率部分保留；
- (3) Band Pass: 只允许频率为指定频率以内部分保留；
- (4) Band Block: 只允许频率为指定频率以外部分保留；
- (5) Threshold: 意为门槛，只允许振幅大于指定数值的部分保留；
- (6) Cutoff Frequency/ Lower Cutoff Frequency/ Upper Cutoff Frequency: 限制的频率范围；
- (7) Threshold: 指定的振幅范围（只在 Filter Type 设置为 Threshold 时可用）；
- (8) Keep DC Offset: DC 偏移值。

在预览窗口部分，左上角为结果的预览图，拖动其中的小方框可以在右上方的放大图中观察方框选定的部分；而拖动预览窗口下面部分的虚线，可以设置 Cutoff Frequency。

完成设置后单击 OK 按钮则完成分析并输出结果，如图 9.7 所示。

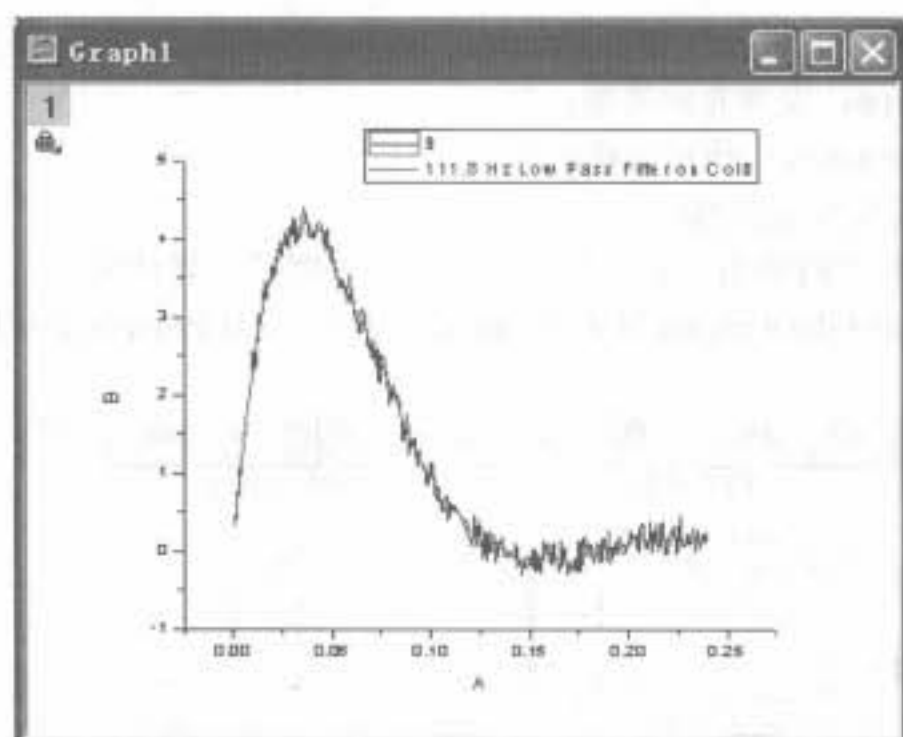


图 9.7 滤波结果

9.3 傅里叶变换

在傅里叶变换 (FFT) 子菜单下, 包含一些与傅里叶变换相关的命令, 只要导入目标数据, 执行对应的命令即可打开相应的对话框, 如图 9.8 所示; 在设置窗口设置完毕后单击 OK 按钮即可完成分析并输出结果。

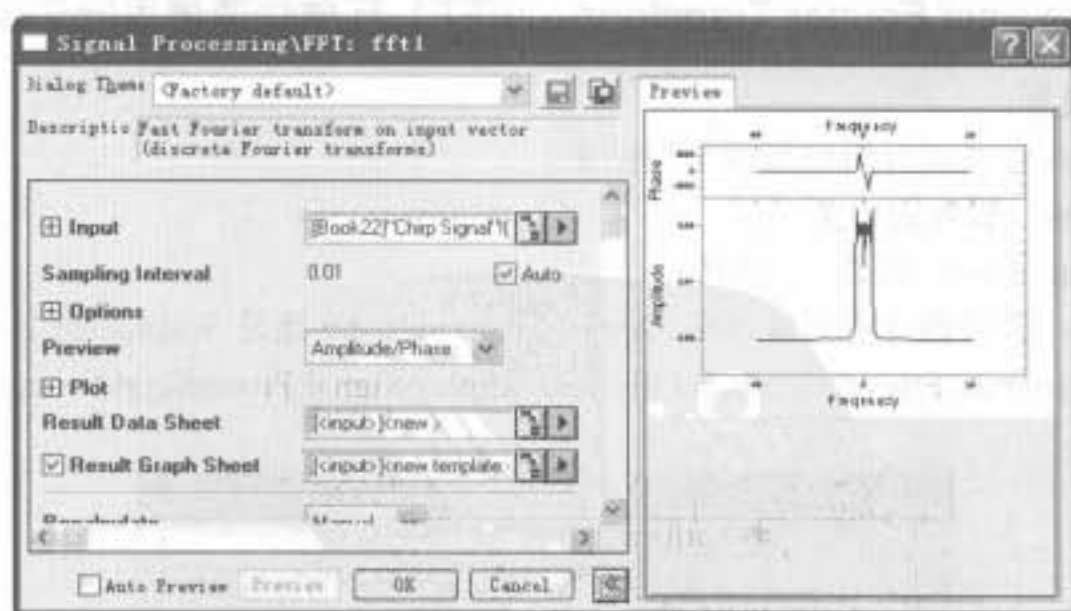


图 9.8 傅里叶变换对话框

下面简单介绍一下各种傅里叶变换的参数设置以及分析样例。

9.3.1 Fast Fourier Transform (FFT) 快速傅里叶变换

主要参数设置:

- (1) Window: 设置窗口类型;
- (2) Shift: 是否重新排列结果以使频率低的数据出现在中间;
- (3) Unwrap phase: 是否打开相位;

- (4) Factor: 设置该分析的规格是 Electrical Engineering 还是 Science 类型;
- (5) Spectrum Type: 设置光谱类型;
- (6) Normalize power to: 指定分析的幂;
- (7) Preview: 设置预览信息;
- (8) Plot: 该标签下的项用于设置是否显示相应类型的计算结果。

样例 (C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Signal Processing\Chirp Signal.dat), 如图 9.9 所示。

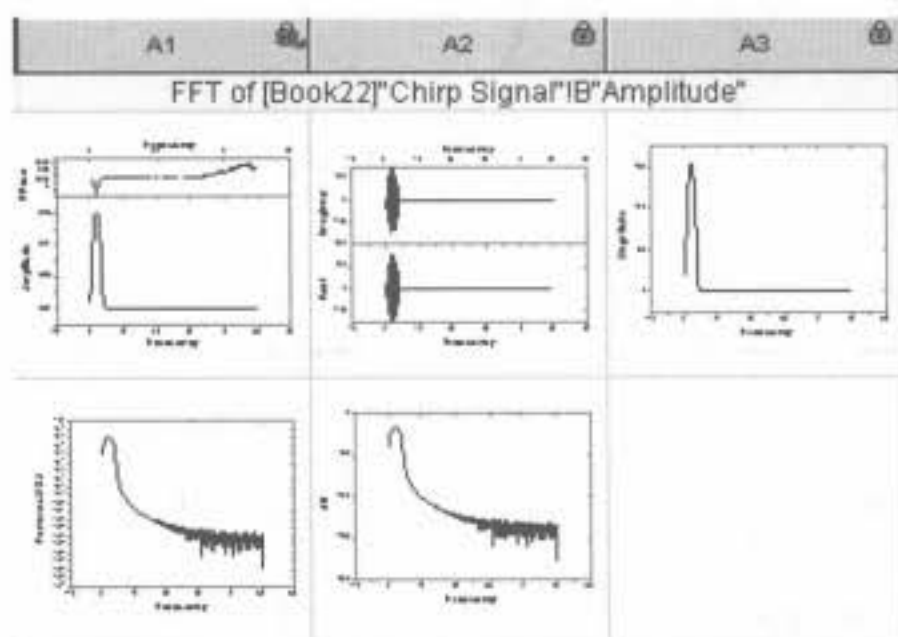


图 9.9 快速傅里叶变换

9.3.2 Inverse Fast Fourier Transform (IFFT) 反向快速傅里叶变换

主要参数设置:

- (1) Plot: 用于设置分析结果的类型结果。
- (2) Window: 设置窗口类型;
- (3) Unwrap phase: 是否打开相位;
- (4) Factor: 设置该分析的规格是 Electrical Engineering 还是 Science 类型。

样例: C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Signal Processing\Average Sunspot.dat, 如图 9.10 所示。

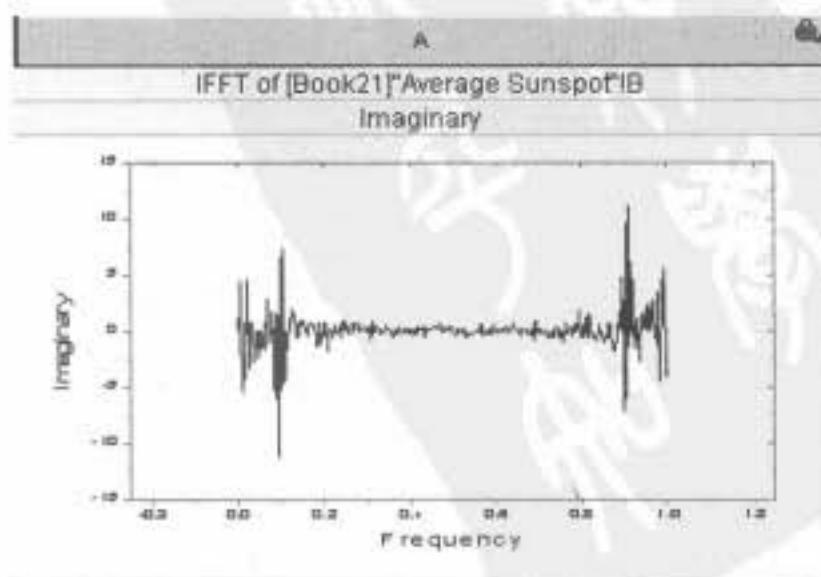


图 9.10 反转傅里叶变换

9.3.3 Short-Time Fourier Transform (STFT) 短时傅里叶变换

主要参数设置:

- (1) Sampling Interval: 设置取样间隔;
- (2) FFT Length: 设置频率线条的长度;
- (3) Window length: 设置窗口长度;
- (4) Overlap: 交叠;
- (5) Window Type: 设置窗口类型;
- (6) Alpha: 设置线条透明度;
- (7) Beta: 设置 Window Type 为 Kaiser 项时的 Beta 参数;
- (8) Option: 设置输出结果项;
- (9) Swap Time and Frequency: 是否交换时间与频率的坐标;
- (10) Output Matrix: 是否输出到 Matrix;
- (11) Plot: 是否输出到 Graph。

样例 (C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Signal Processing\fftfilter2.dat), 如图 9.11 所示。

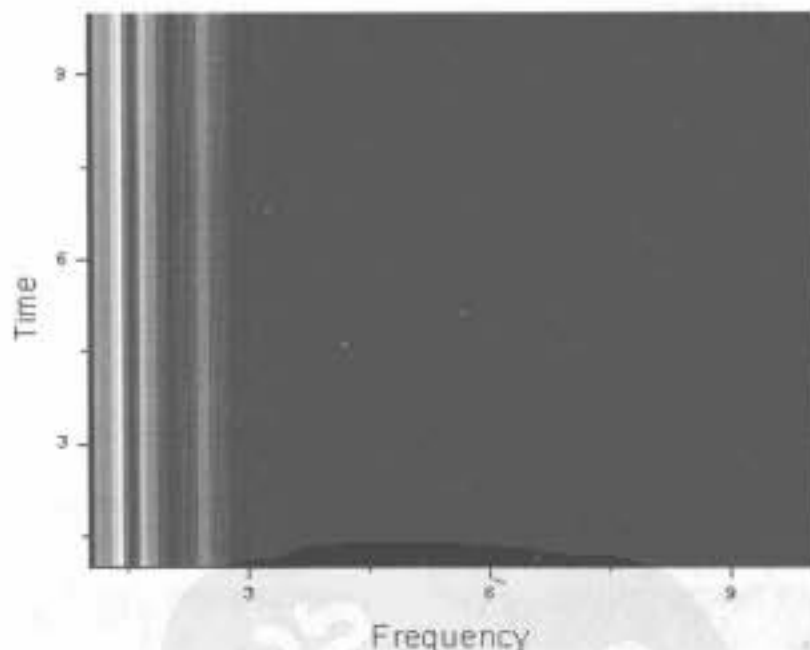


图 9.11 短时傅里叶变换

9.3.4 Convolution 卷积

主要参数设置:

- (1) Signal: 输入的信号数据;
- (2) Response: 输出计算结果的位置;
- (3) Sampling Interval: 取样间隔;
- (4) Normalize Response: 是否将输出结果格式化;
- (5) Wrap Response: 回绕响应;
- (6) Convolution Type: 选择卷积类型。

样例 (C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Signal Processing\Convolution.dat), 如图 9.12 所示。

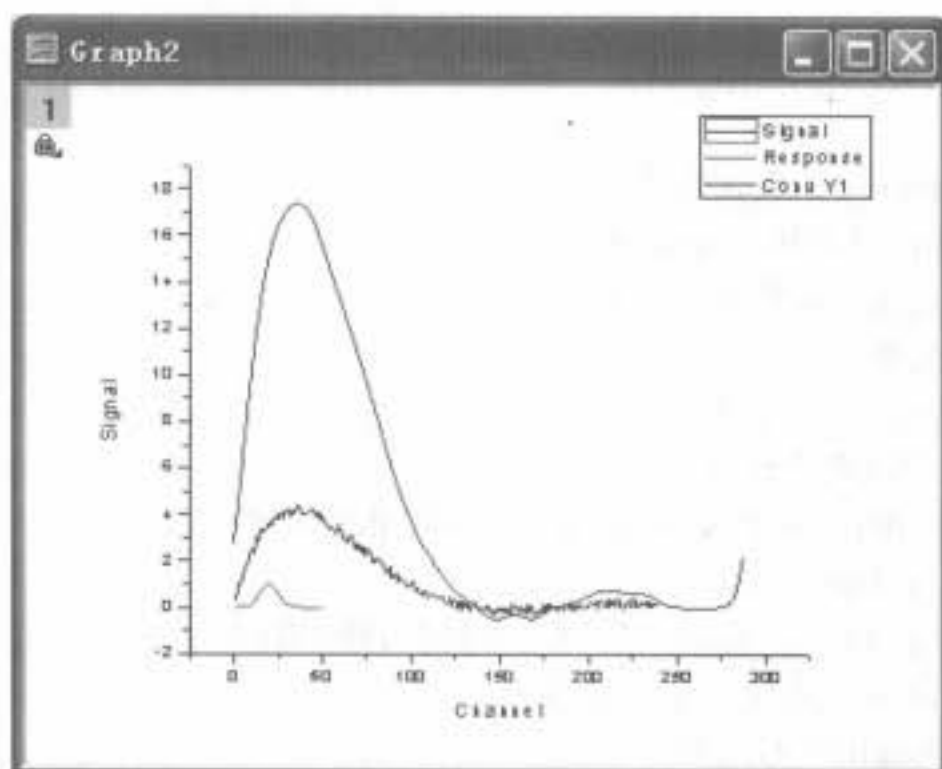


图 9.12 卷积

9.3.5 Deconvolution 解卷积

主要参数设置:

- (1) Signal: 输入的信号数据;
- (2) Response: 输出计算结果的位置;
- (3) Sampling Interval: 取样间隔;
- (4) Normalize Response: 是否将输出结果规范化;
- (5) Wrap Response: 回绕响应;
- (6) Deconvolution Type: 选择反卷积类型。

样例 (C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Signal Processing\Deconvolution.dat), 如图 9.13 所示。

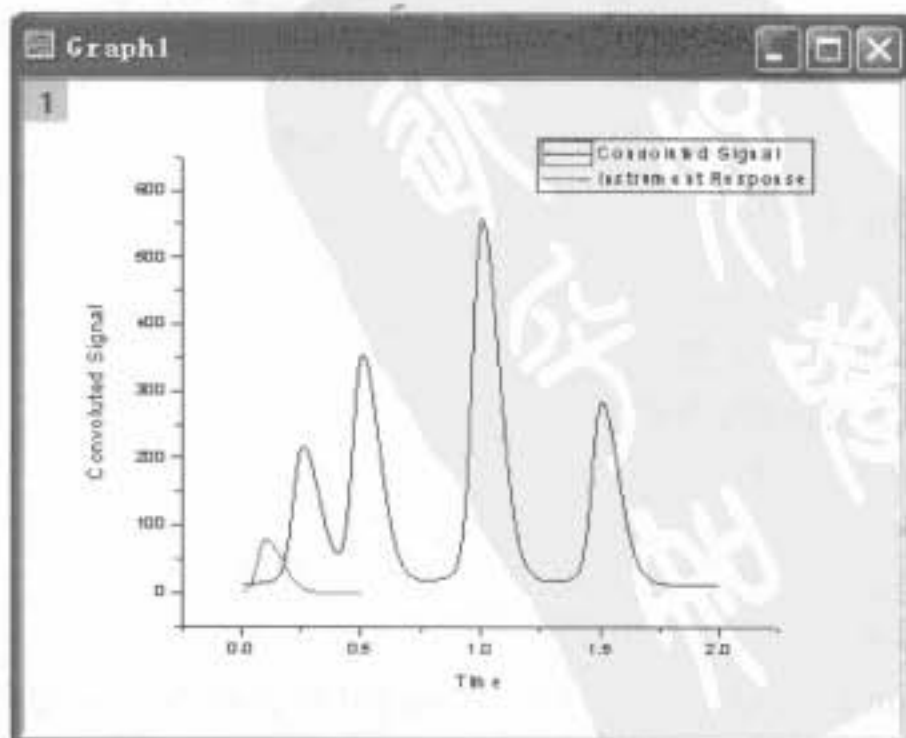


图 9.13 解卷积

9.3.6 Coherence 相干性

主要参数设置:

- (1) Input1/ Input2: 输入数据;
- (2) Sampling Interval: 取样间隔;
- (3) FFT Length: 设置频率线条的长度;
- (4) Window Type: 设置窗口类型;
- (5) Window length: 设置窗口长度;
- (6) Overlap: 交叠;
- (7) Alpha: 设置线条透明度;
- (8) Beta: 设置 Window Type 为 Kaiser

项时的 Beta 参数。

样例 (C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Signal Processing\Coherence.dat), 如图 9.14 所示。

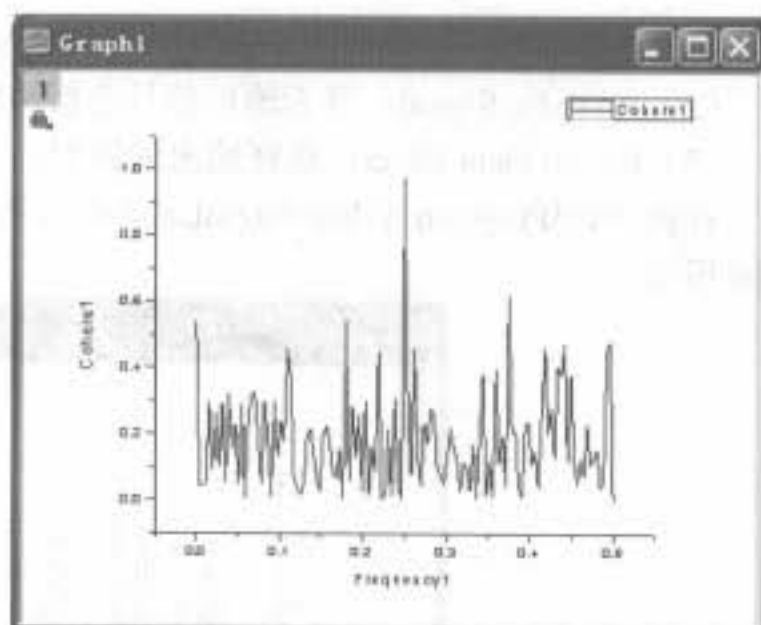


图 9.14 相干性

9.3.7 Correlation 相关性

主要参数设置:

- (1) Input1/ Input2: 输入数据;
- (2) Sampling Interval: 取样间隔;
- (3) Type: 选择分析的类型是 linear (线性) 还是 circular (循环);
- (4) Normalize Response: 是否将输出结果规范化。

样例 (C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Signal Processing\Coherence.dat), 如图 9.15 所示。

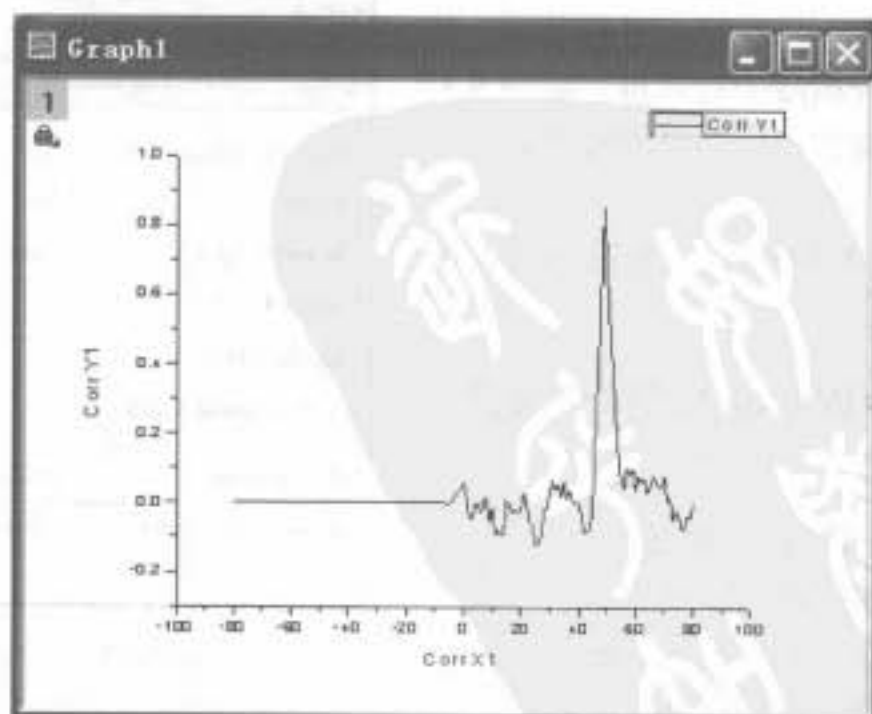


图 9.15 相关性

9.3.8 Hilbert Transform 希耳伯特变换

主要参数设置:

- (1) Hilbert: 是否输出 Hilbert Transform 的数据;
- (2) Analytic Signal: 是否输出信号分析的数据;
- (3) Result Data Sheet: 选择输出的位置;

样例 (C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Signal Processing\fftfilter2.dat), 如图 9.16 所示。

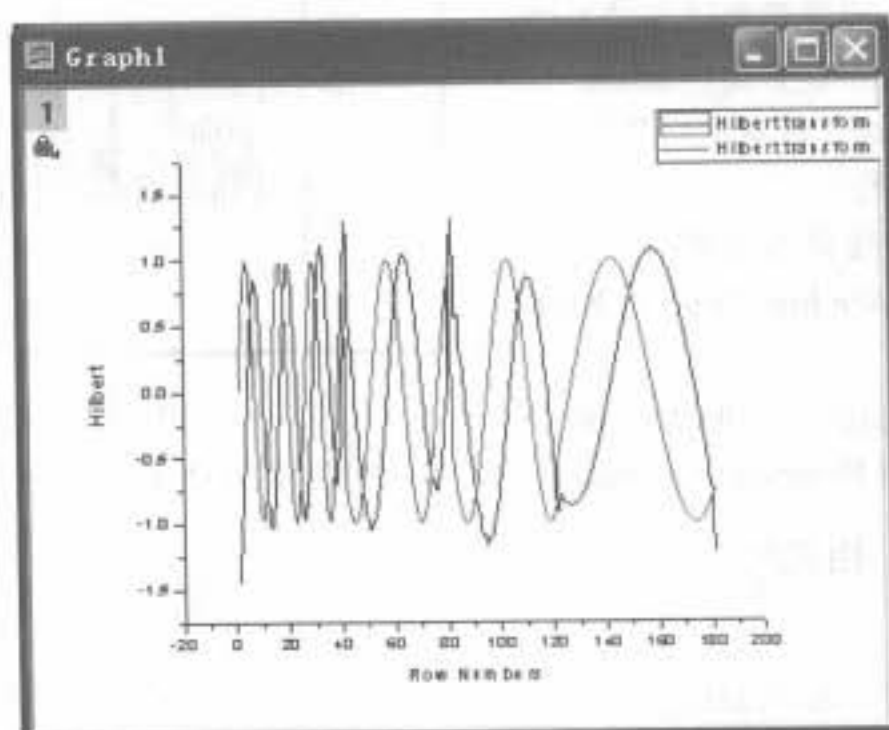


图 9.16 希耳伯特变换

9.4 小波变换

在小波变换 (Wavelet) 子菜单下, 包含一些与小波变换相关的命令, 只要导入目标数据, 执行对应的命令即可打开相应的对话框, 如图 9.17 所示; 在设置窗口设置完毕后单击 OK 按钮即可完成分析并输出结果。

下面简单介绍一下各种小波变换的参数设置以及分析样例。

9.4.1 Continuous Wavelet 连续小波变换

主要参数设置:

- (1) Discrete Signal: 输入数据;
- (2) Scale: 控制输出结果的范围;
- (3) Wavelet Type: 设置分析方法;
- (4) Wave Number: 设置波数;
- (5) Coefficient: 输出数据的位置;
- (6) Coefficient Matrix: 是否输出到 Matrix。

样例 (C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Signal Processing\fftfilter2.dat), 如图 9.18 所示。

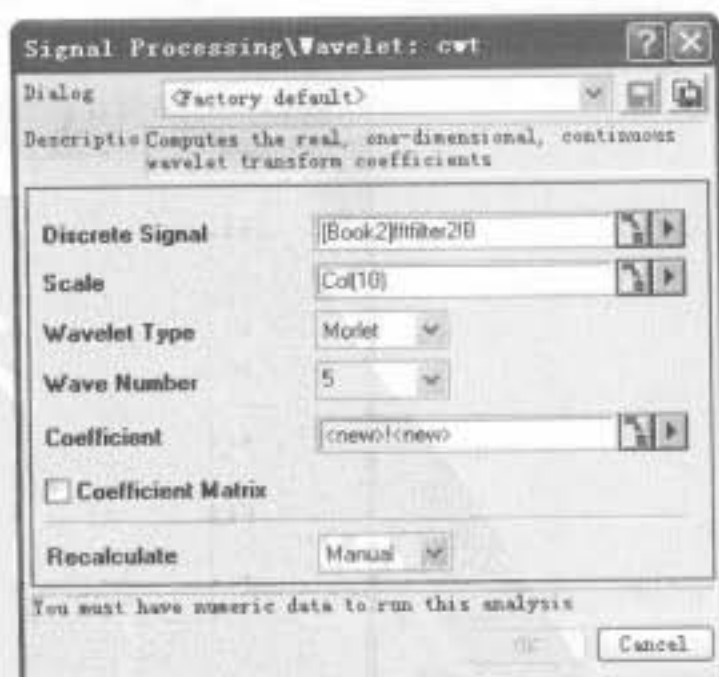


图 9.17 小波变换对话框

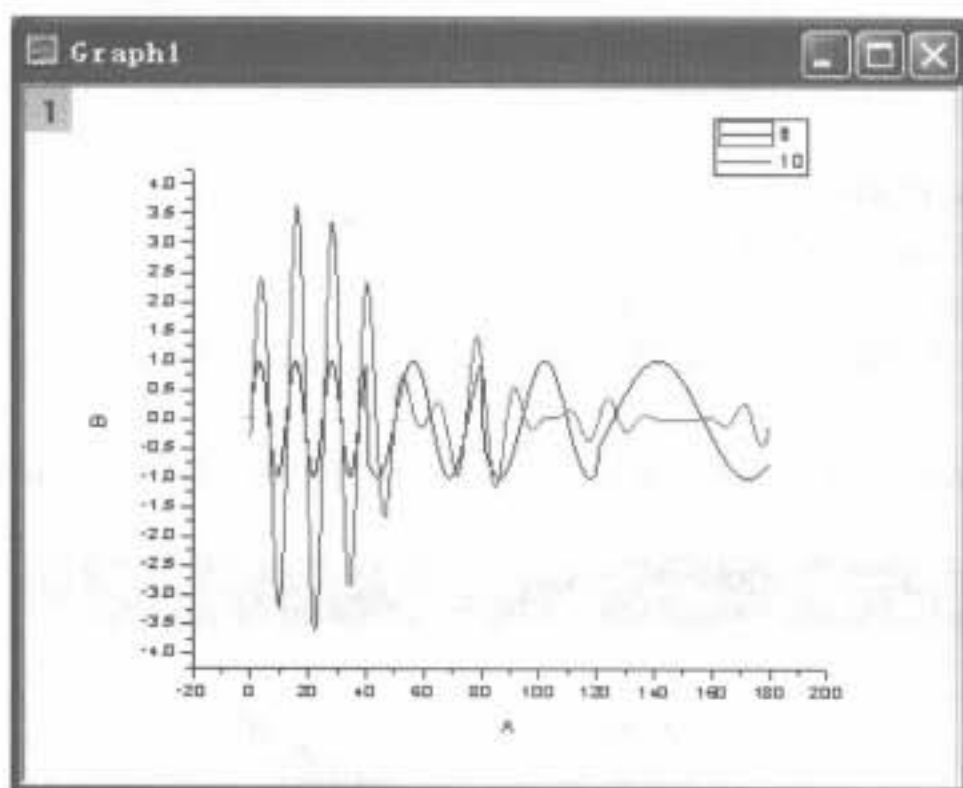


图 9.18 连续小波变换

9.4.2 Decompose 分解

主要参数设置:

- (1) Wavelet Type & Order: 设置分解的方法;
- (2) Extension Mode: 控制输出的结果是 Periodic (周期性显示) 还是 Zero-padded (以 0 填补末端);
- (3) Approx Coefficient: 设置近似值系数;
- (4) Detail Coefficient: 细节系数。

样例 (C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Signal Processing\fftfiler1.dat), 如图 9.19 所示。

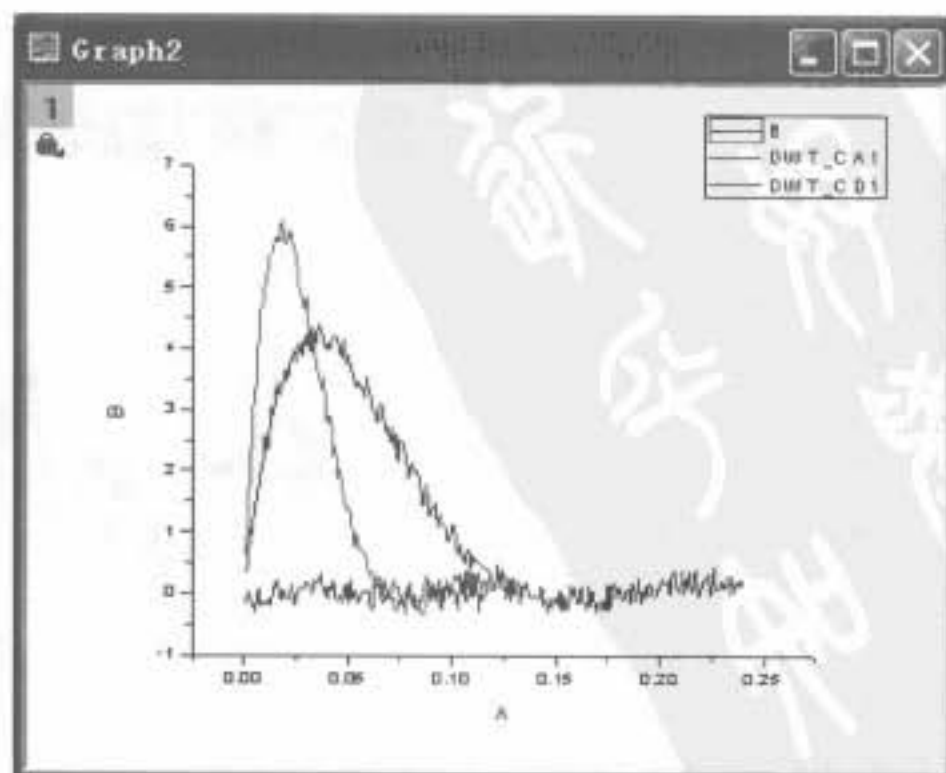


图 9.19 分解

9.4.3 Reconstruction 重建

主要参数设置:

- (1) Approx Coefficient: 设置近似值系数;
- (2) Detail Coefficient: 细节系数。
- (3) Wavelet Type: 设置重构的方法;
- (4) Boundary: 控制输出的结果是 Periodic (周期性显示) 还是 Zero-padded (以 0 填补末端)。

样例 (C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Signal Processing\Chirp Signal.dat), 如图 9.20 所示。

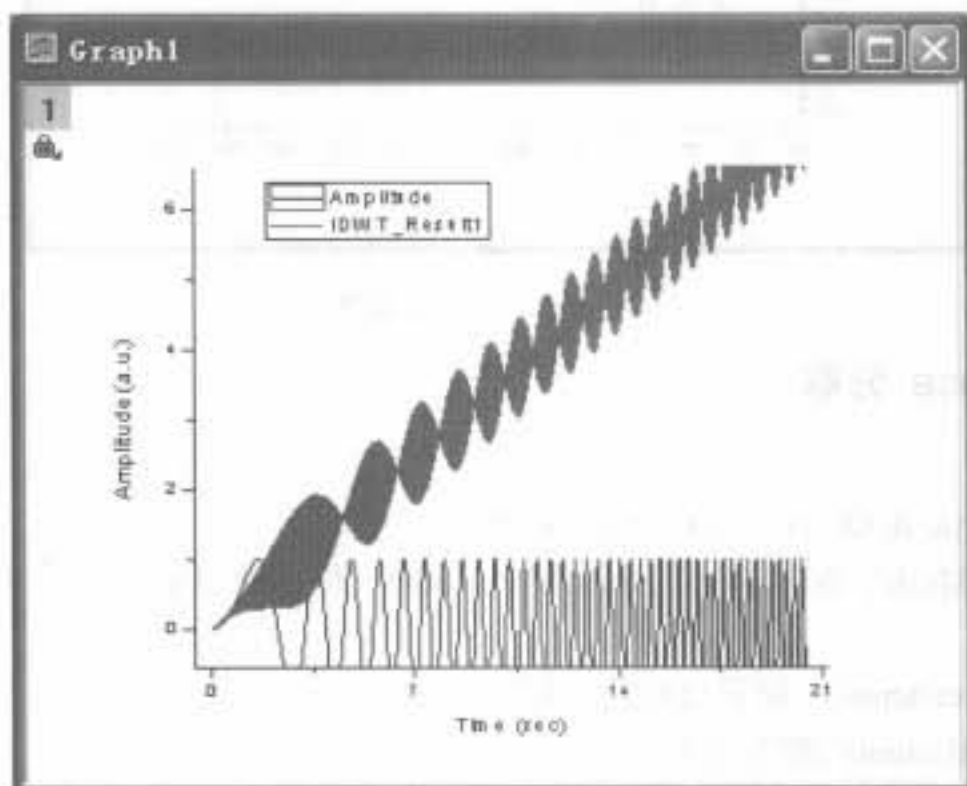


图 9.20 重建

9.4.4 Multi-Scale DWT 多尺度离散小波变换

主要参数设置:

- (1) Wavelet Type: 设置平滑的方法;
- (2) Extension Mode: 控制输出的结果是 Periodic (周期性显示) 还是 Zero-padded (以 0 填补末端);
- (3) Decomposition Level: 设置分解水平的百分比;
- (4) Multiple Coeff Data: 设置输出的目标。

样例 (C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Signal Processing\Signal with High Frequency Noise.dat), 如图 9.21 所示。

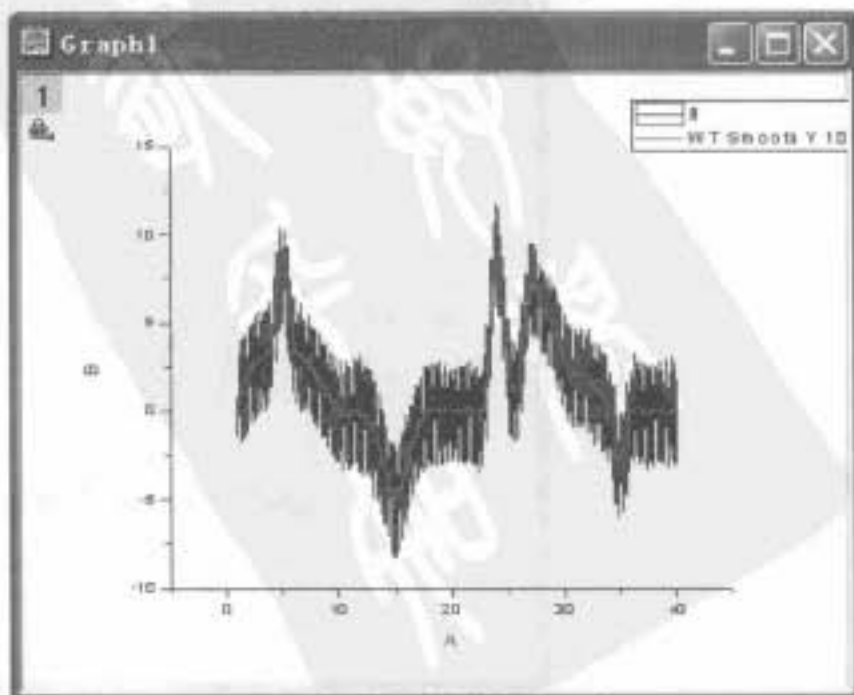


图 9.21 多尺度离散小波变换

9.4.5 Denoise 除噪

主要参数设置:

- (1) Wavelet Type: 设置除噪的方法;
- (2) Extension Mode: 控制输出的结果是 Periodic (周期性显示) 还是 Zero-padded (以 0 填补末端);
- (3) Threshold Type: 设置除噪系数的值是 custom (指定值) 还是 sqtwolog (根据计算所得);
- (4) Thresholding Level: 设置除噪水平;
- (5) Threshold of every Level (%): 在 Threshold Type 项为 custom 时指定的除噪系数。

样例 (C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Signal Processing\Step Signal with Random Noise.dat), 如图 9-22 所示。

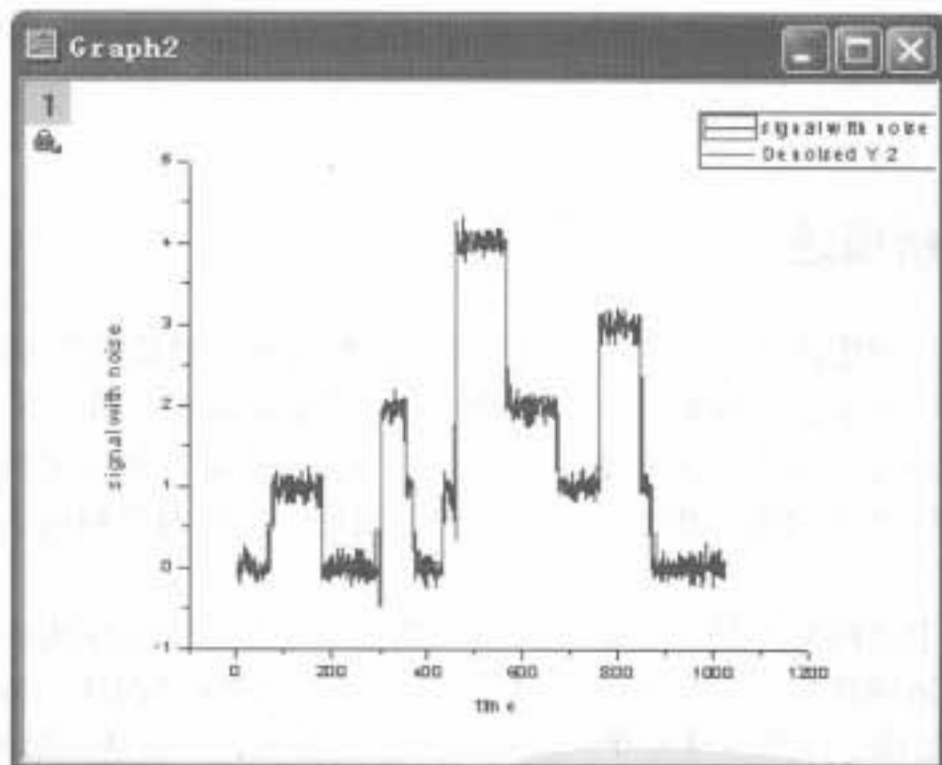


图 9.22 除噪

9.4.6 Smooth 平滑

主要参数设置:

- (1) Wavelet Type: 设置平滑的方法;
- (2) Extension Mode: 控制输出的结果是 Periodic (周期性显示) 还是 Zero-padded (以 0 填补末端);
- (3) Cutoff (%): 设置平滑水平的百分比。

样例 (C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Signal Processing\Signal with High Frequency Noise.dat), 如图 9.23 所示。

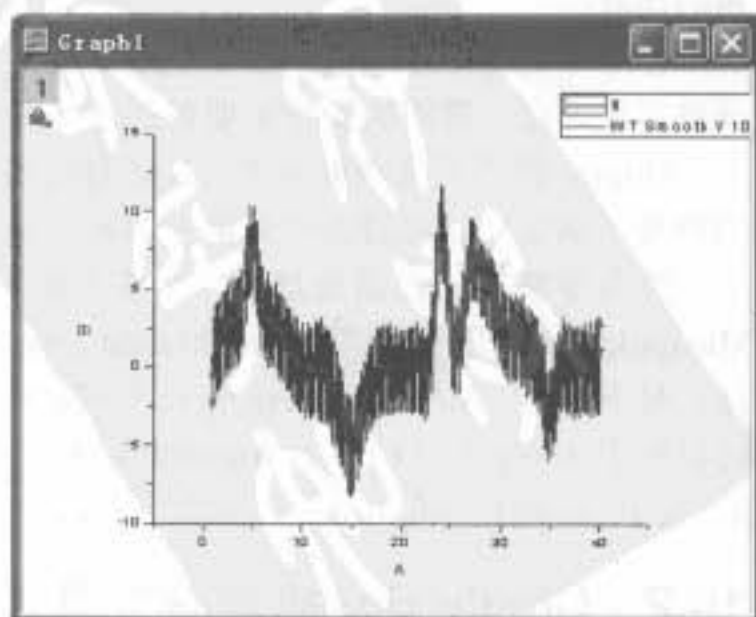


图 9.23 平滑

本章要点

- 扣除基线
- 波谱寻峰
- 多峰积分

10.1 光谱分析概述

无论是对静态的物质还是其运动过程进行研究,都离不开对其物理或化学性质进行检测,为了快速并且准确地获取这些数据,需要使用到大型仪器即仪器分析方法。从大的方向来说,现代仪器分析可以分为光(电磁波)谱、色谱、电学、热学等,用于研究物质对特定波长光的响应情况、固液气之间的相互作用、电流电压电阻的变化以及受温度、磁声变化影响的情况等。

仪器检测的结果通常并不是一个定点的量,而是一个在一定范围内扫描的图谱,这些图谱可以置换为数据然后转换到处理软件中进行分析。通过对这些图谱的分析,就可以进一步确定物质的种类、结构、性质及其变化情况。对图谱的分析,一般情况最重要的是峰(或者谷)的位置、强(高)度、宽度、分裂情况等。因此光谱分析最重要的是寻峰、峰标记、峰宽和峰面积的计算。

在进行这些工作之前,由于仪器、使用条件和分析方法本身的误差,有必要对得到的图谱进行预处理,常用的操作主要包括扣除基线或背景、平滑等。

Origin 提供了这些最基本的光谱分析的功能,主要包括 Analysis → Spectroscopy 菜单下的命令,本章后面将对这个菜单中的相关命令进行介绍。

然而事实上,光谱处理是一个综合的过程,对于基线或递增的扣除,Analysis → Data Manipulation 菜单中的 Subtract Straight Line 和 Subtract Reference Data 其实也是一个不错的选择,对于平滑,Signal Processing 信号处理中有各种很好的平滑处理算法,对于峰标记,显然可以使用 Tools 工具栏中的 Annotation 标记工具,对于峰拟合,Fitting 拟合菜单中提供了 Fit Single Peak 和 Fit Multi-Peaks 的命令。以上方法请参考前面各章内容,这里不再重述。

10.2 Create Baseline 建立基线

要对数据建立基线,可以按照以下步骤进行。

首先通过 File → Import 导入要分析的数据，这里以 C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Spectroscopy\Peaks with Base.DAT 为例。

然后根据该数据集绘制 2D Graph（线图）。

再通过 Analysis → Spectroscopy → Create Baseline 命令打开对话框建立基线，如图 10.1 和图 10.2 所示。

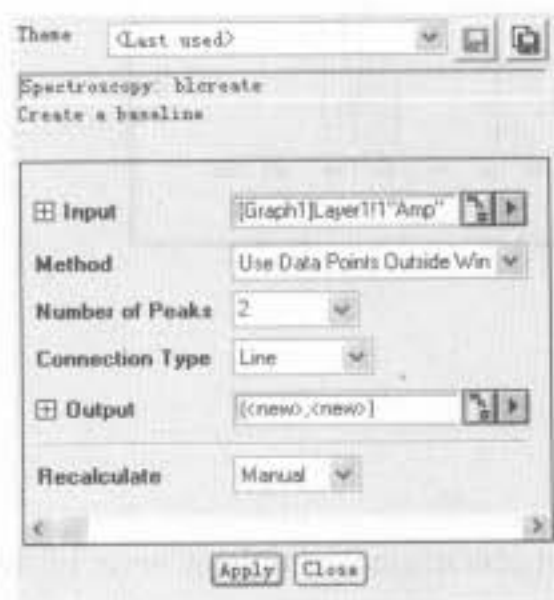


图 10.1 建立基线对话框（左）

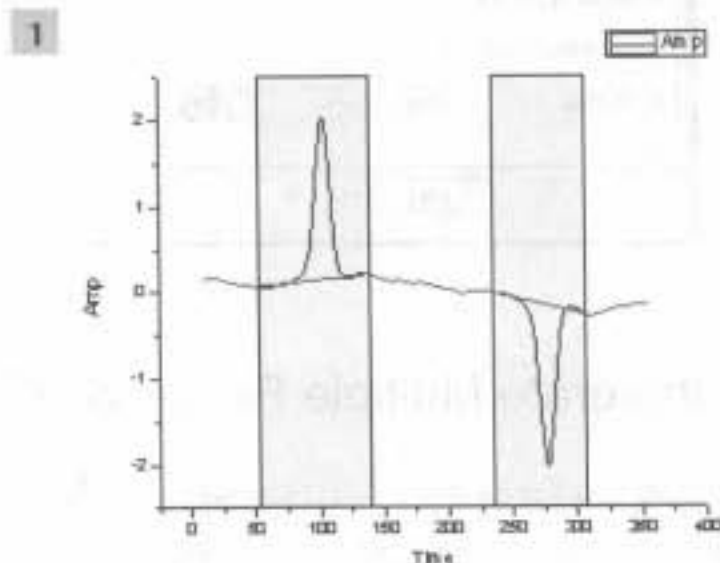


图 10.2 建立基线对话框（右）

该对话框分左右 2 部分，左边为设置框，右边为预览框，如图 10.3 所示。在设置框里面，除了可以设置常见的 Input、Output 和 Recalculate 项以外，还有以下设置项：

Method 项：可以设置为 Auto-create a modifiable baseline（选择所有区域，自动完成分析），或者 Use Data Points Outside Window（由用户自行选择要分析的数据范围）；

当 Method 项设置为 Auto-create a modifiable baseline 时，设置框里面又会出现 Baseline Algorithm（基线计算方法）和 Number of Baseline Points（基线的折点数）：

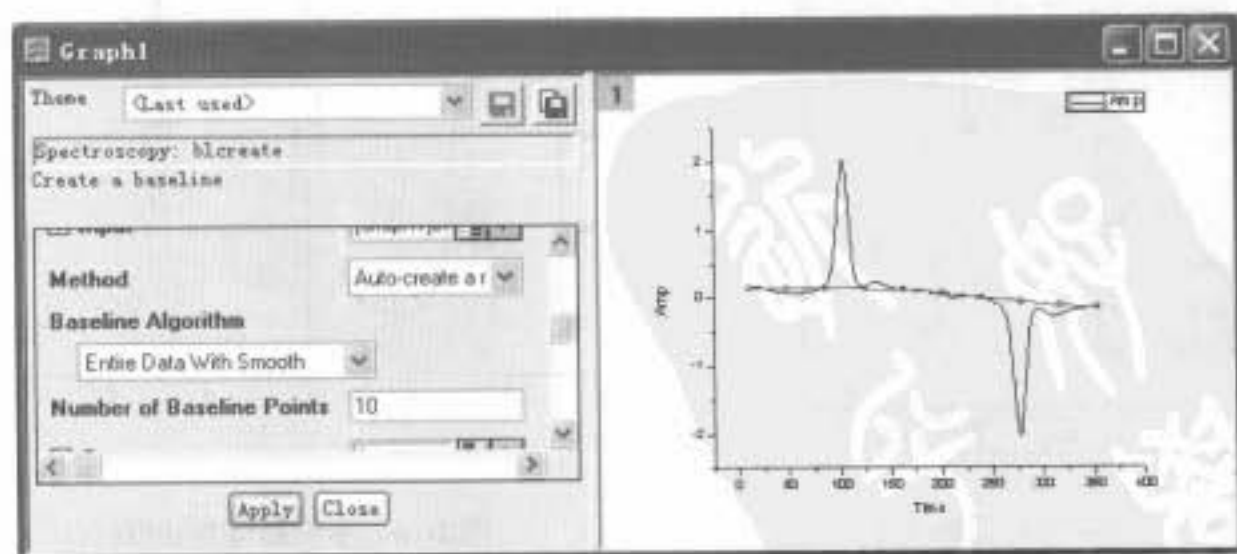


图 10.3 建立基线参数设置

而当 Method 项设置为 Use Data Points Outside Window 时，设置框里面则可以设置 Number of Peaks（峰数目）和 Connection Type（基线的分析方式）：

设置完毕之后单击 Apply 按钮即可完成建立基线操作，结果会显示在相应的 Graph 和 Worksheet 上面，如图 10.4 所示。

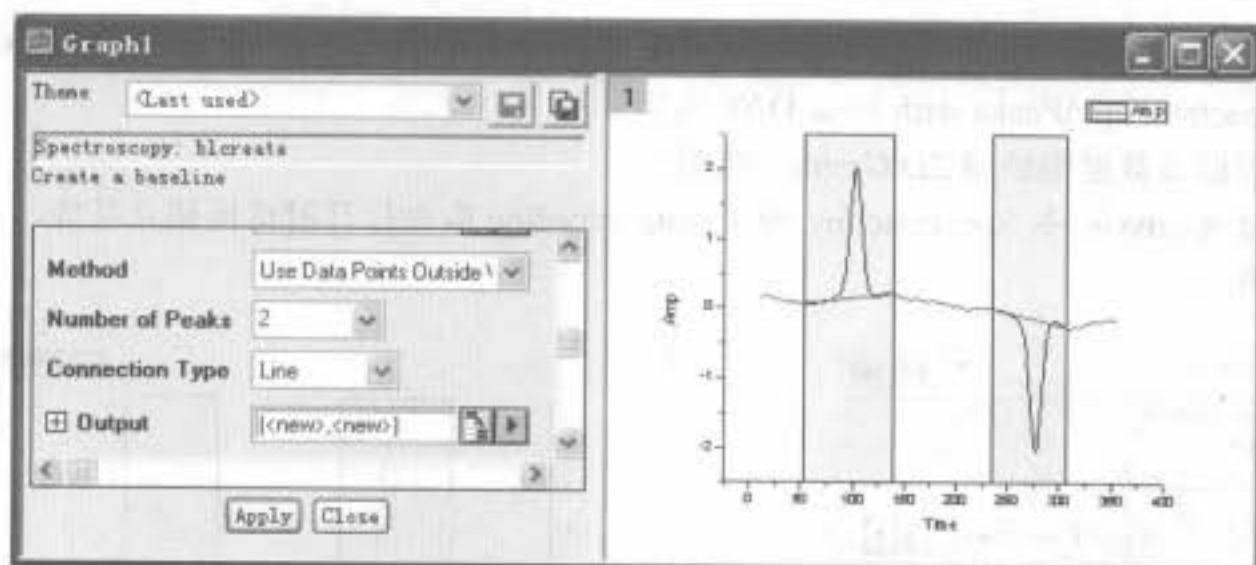


图 10.4 建立基线参数设置

10.3 Integrate Multiple Peaks 多峰积分

要对数据进行多峰积分，可以按照以下步骤进行操作。

首先，导入要分析的数据，以 C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Curve Fitting\Multiple Peaks.dat 为例。然后生成相应的 Graph。

然后通过 Analysis → Spectroscopy → Integrate Multiple Peaks 命令打开对话框。

同样，这个对话框也是分成设置和预览两个部分的，如图 10.5 和图 10.6 所示。

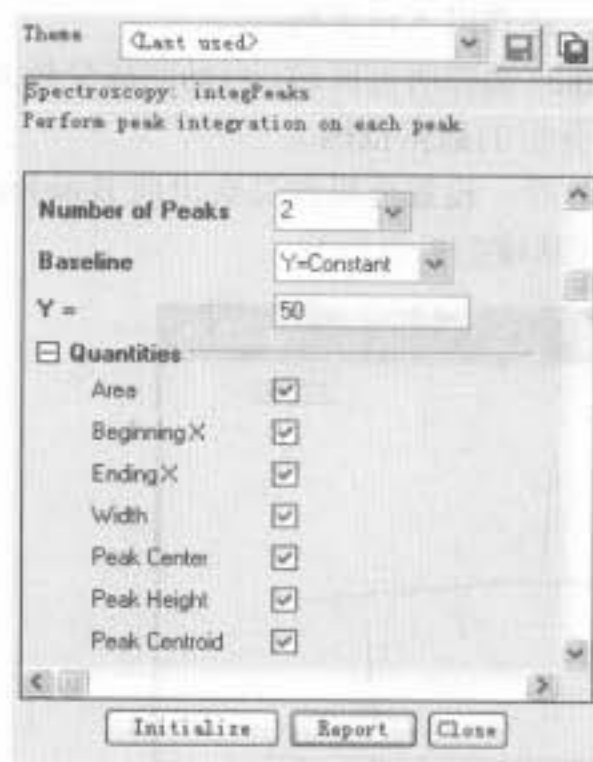


图 10.5 多峰积分对话框(左)

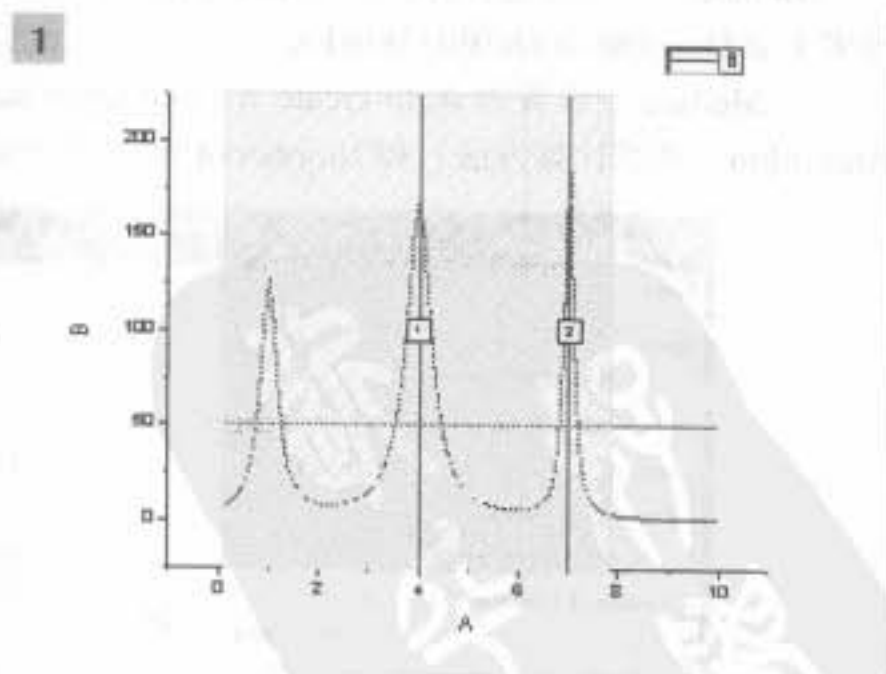


图 10.6 多峰积分对话框(右)

在设置框里面可设置的项包括 Number of Peaks (峰数目)、Baseline 和 Y 值 (基线的计算方法)、Quantities (是否显示一些统计项，会在分析报表里面列出)、Results Log Output (是否输出到 Results Log 里面) 以及 Input、Output 等常见的设置项，如图 10.7 和图 10.8 所示。

设置完毕之后单击 Report 按钮即可完成分析并输出结果。

结果项包括 Quantities 项里面打上勾的统计项，以及峰的积分结果和基线数据。

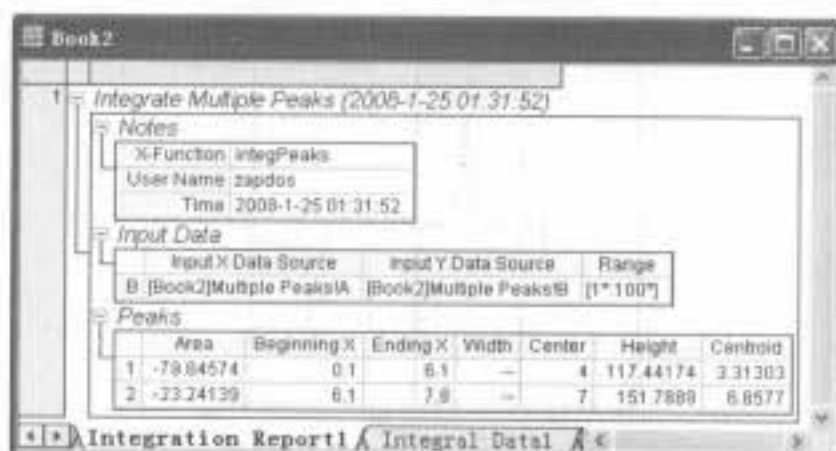


图 10.7 多峰积分结果报表

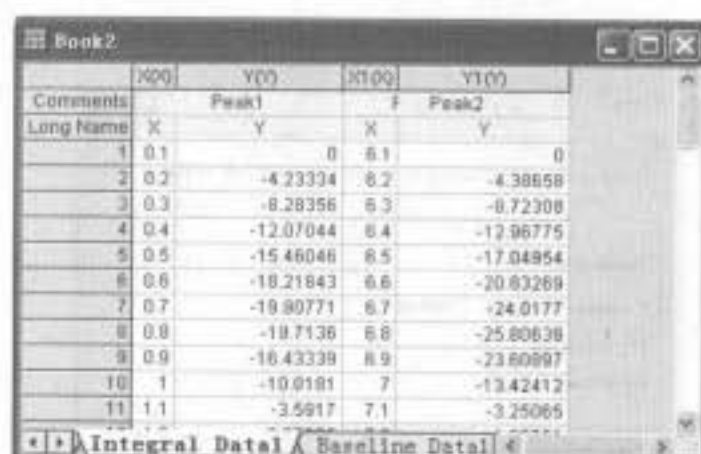


图 10.8 多峰积分结果生成数据表

10.4 Baseline and Peaks 基线和峰分析向导

Baseline and Peaks 其实是一个光谱处理向导，集中了光谱处理的常用功能。

首先通过 File → Import 导入要分析的数据，这里以 C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Spectroscopy\Peaks with Base.DAT 为例，对 B 列作线图。

通过 Analysis → Spectroscopy → Baseline and Peaks 命令可以打开光谱分析向导。同样地，这个对话框也是分为设置和预览 2 部分的，分析步骤分为 4 步，如图 10.9 所示。

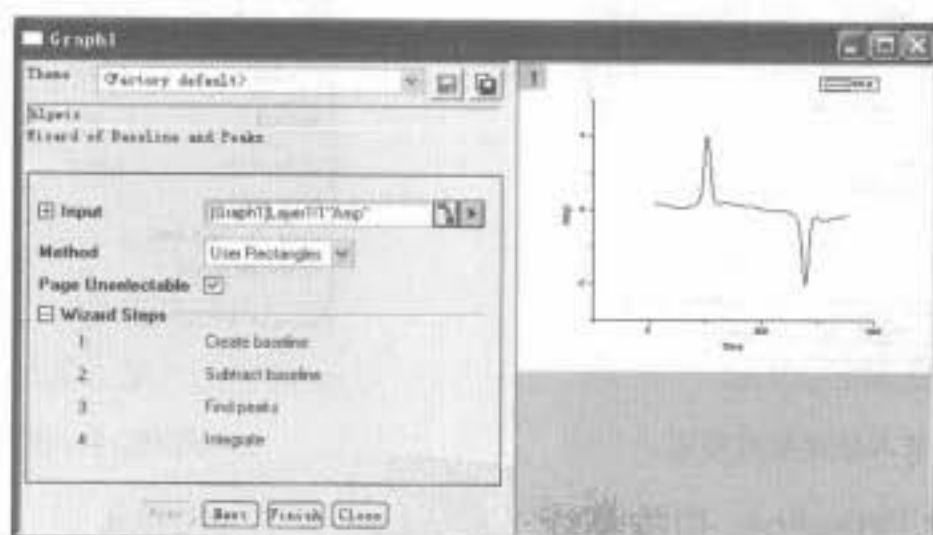


图 10.9 基线和峰分析对话框

10.4.1 Create Baseline 建立基线

在这一步里面，可以设置基线分析的选项：

Method 项：选择设置基线的方式，包括 User Rectangle（手动）、Auto Create（自动）、Existing DataSet（从现有的数据集引入）、None（不设置）；

当 Method 项设置为 User Rectangle 时单击 Next 按钮，可以进入手动设置基线方式，设置 Number of Rect（要设置的范围数目）、Connection Type（基线计算方式），以及在预览图上设置计算的范围，如图 10.10~图 10.12 所示。

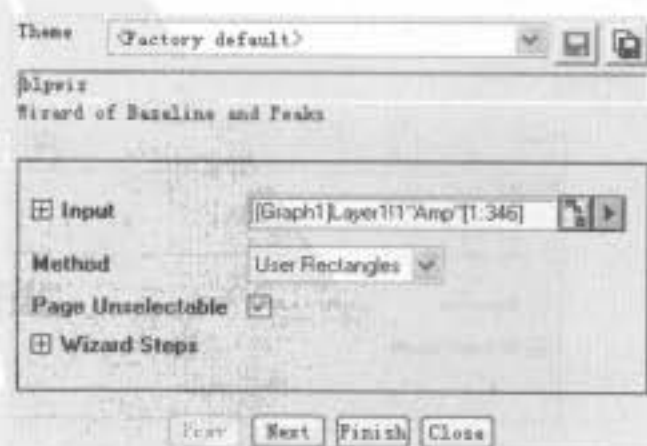


图 10.10 基本处理

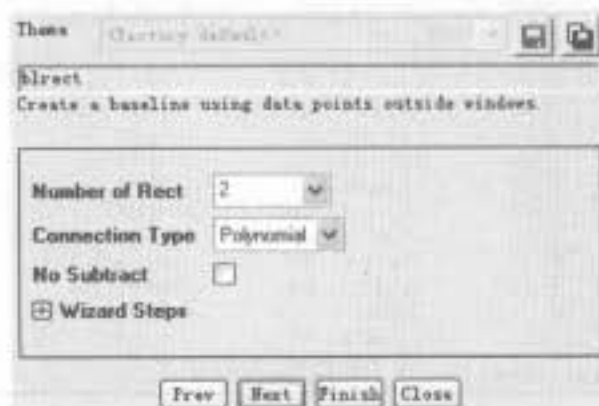


图 10.11 基本处理参数

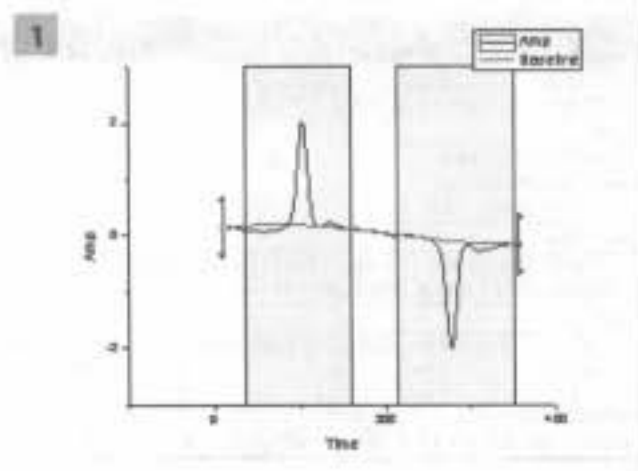


图 10.12 基本处理参数预览

当 Method 项设置为 Auto Create 时单击 Next 按钮，可以进入自动设置基线方式。可以设置 Baseline Type（基线是否为自动完成或常量）、Points of Baseline（基线的折点数）和 Method（基线计算方式）。

还可以通过将 Method 项设置为 Auto Create，单击 Next 按钮，选择现有的 Baseline，如图 10.13 和图 10.14 所示。



图 10.13 基本处理参数设置

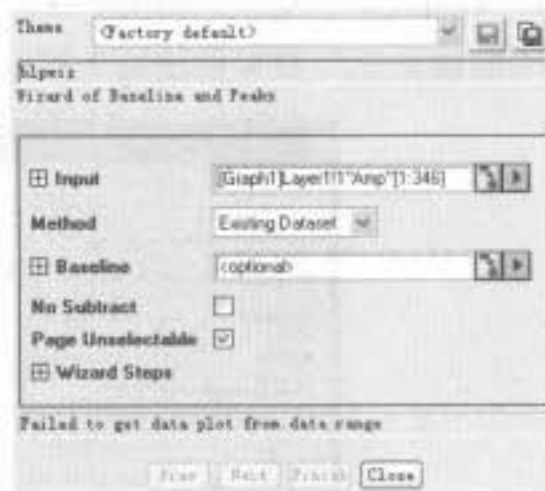


图 10.14 建立基线

10.4.2 Subtract Baseline 扣除基线

在这个步骤里面你可以调整已生成的 Baseline，调整完毕单击 Apply 按钮即可完成调整，如图 10.15 和图 10.16 所示。



图 10.15 扣除基线

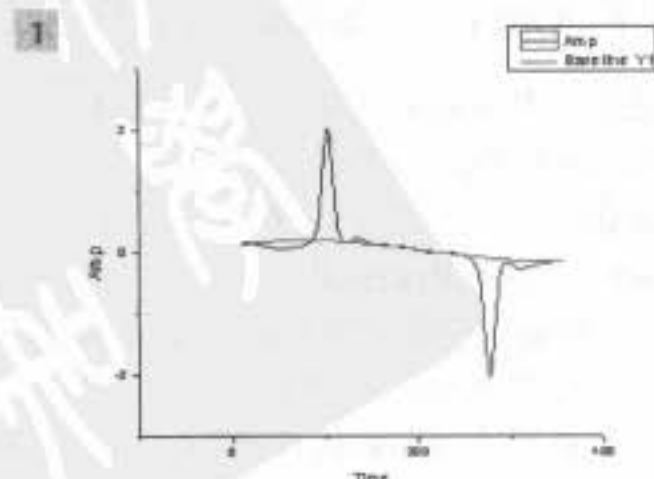


图 10.16 扣除基本预览

10.4.3 Find Peaks 寻峰

在这个步骤下面,可以在 Method 选项选择寻峰的方式,主要包括:

Local Max 方式: 可以设置 Direction (峰的方向: 正、负或双向)、Local Points (峰数)、Size Option (峰的尺寸选项)、Min Height (峰的最小高度)、Min/Max Width (峰的最小/大宽度),以及 Show 标签下的一些信息选项,如图 10.17~图 10.19 所示。

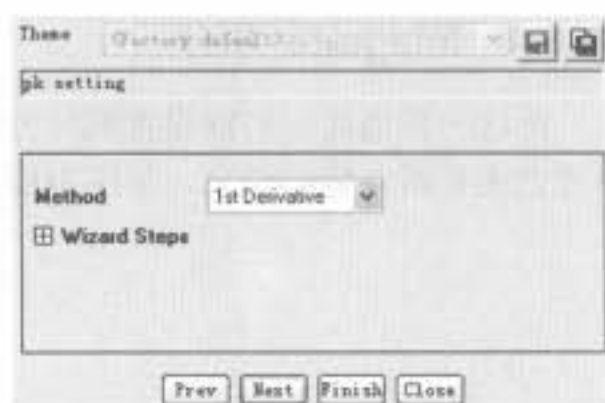


图 10.17 寻峰



图 10.18 寻峰处理参数设置

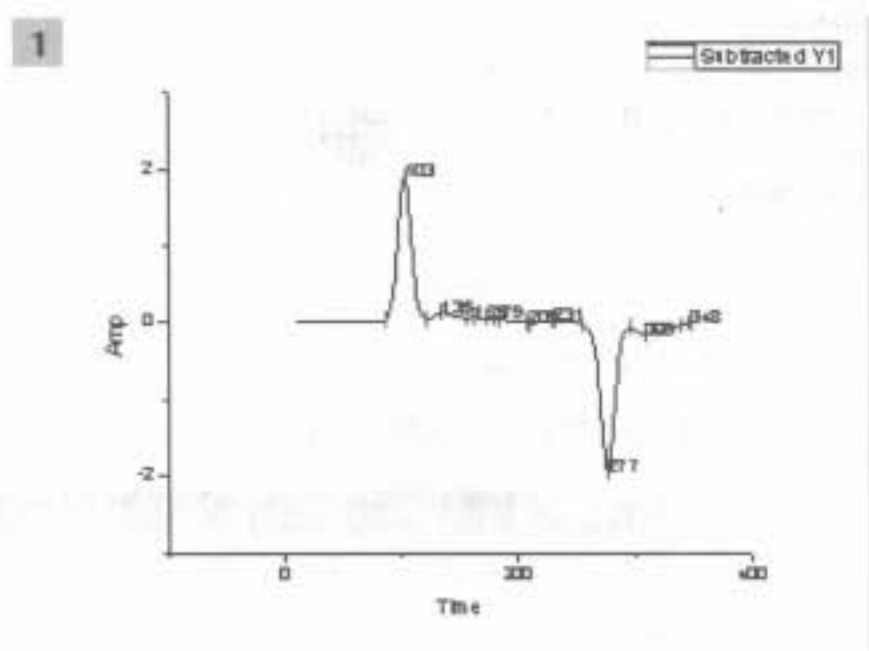


图 10.19 寻峰结果预览

另外 Window Search 和 1st Derivative 2 种方法的设置与 Local Max 大同小异,如图 10.20 所示。

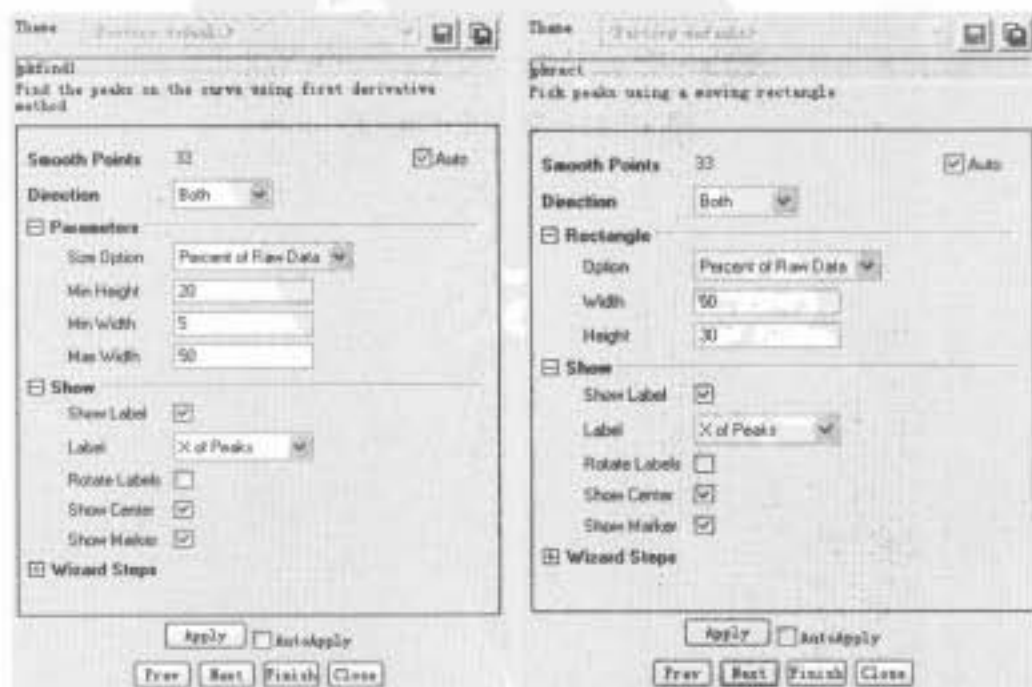


图 10.20 寻峰参数选择

10.4.4 Integrate 积分

在这一步里面，可以设置积分方法以及输出数据位置等参数，完成之后单击 Finish 按钮即可完成分析并输出结果，如图 10.21 和图 10.22 所示。



图 10.21 积分曲线

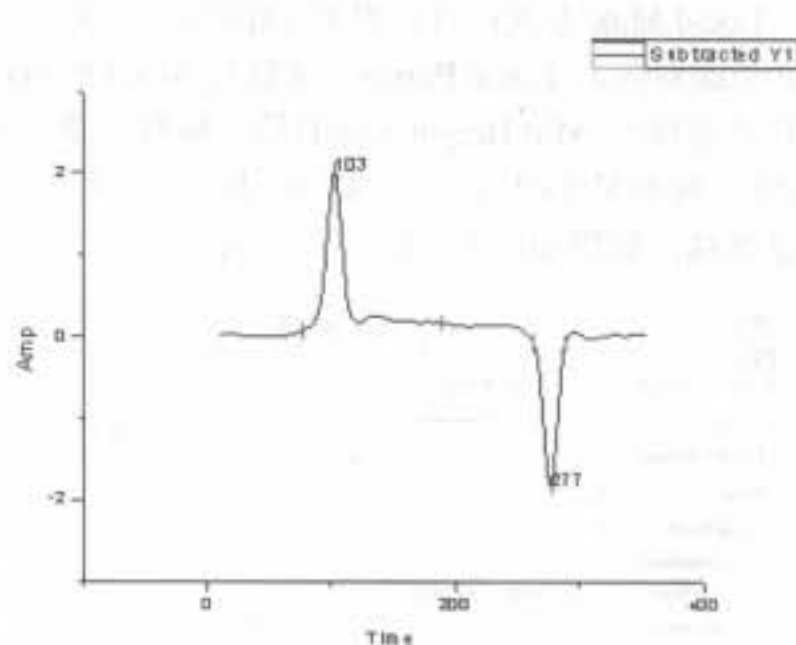


图 10.22 最终结果

所有步骤的处理结果和报表参见 Worksheets 所示，如图 10.23 所示。

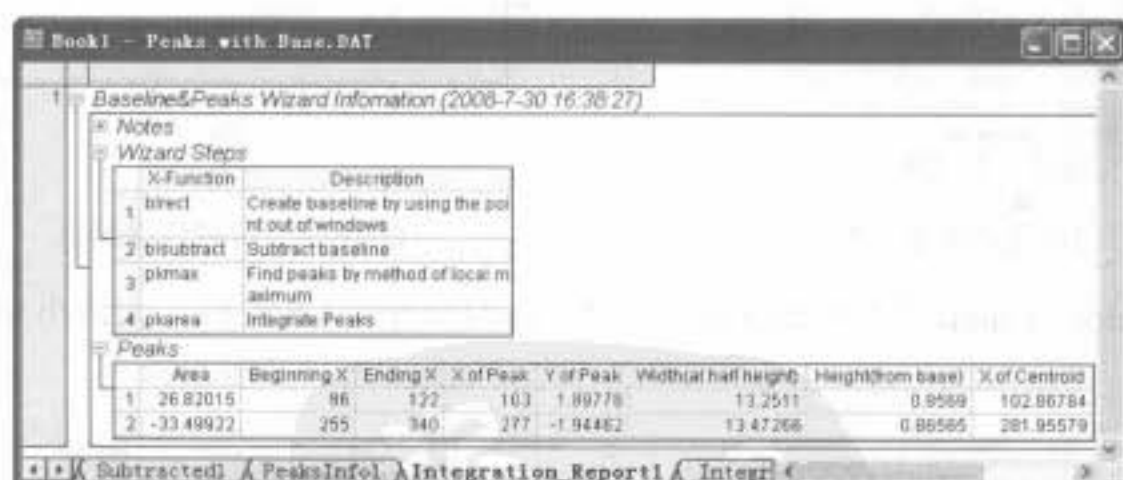


图 10.23 数据分析结果

本章要点

- 统计简介
- 描述统计
- 统计作图
- 假设检验
- 方差分析
- 样本分析

11.1 统计分析简介

11.1.1 什么是统计学

统计学 (Statistics) 是一门是关于数据的收集、整理、分析和解释的科学, 是一门认识方法论性质的科学, 其目的是探索数据内在的数量规律性, 以达到对客观事物的科学认识。统计通过研究随机样本现象, 并以此为依据, 对总体特征进行推断和解释, 直到为采取一定的决策和行动提供依据与建议时止, “由部分推及全体”的思想贯穿于统计学的始终。

用统计来认识事物的步骤是: 分析问题→研究设计→抽样调查→数据整理→统计推断→结论及解释。这里, 研究设计就是制定调查研究和实验研究的计划; 抽样调查是搜集资料的过程; 数据整理根据统计研究的目的对调查所得原始材料进行审核、分类、汇总等初步处理; 统计推断是分析资料的过程, 得出一系列有用的指标和结论。显然统计的主要功能是推断, 而推断的方法是一种不完全归纳法, 因为是用部分资料来推断总体。

理论上, 调查的样本越大 (多), 统计的结果越客观, 推断的结论就越正确。然而, 全面的调查不但资源耗费极大, 而且往往客观上受到制约, 甚至不能实现。因此, 统计学研究了一系列的原理和方法, 主要涉及抽样调查的有效性和统计分析的科学性, 以便能够在对合理数量的样本 (总体数据的子集) 数据分析的基础上, 得出有价值的结论和推断。

统计学是一种应用数学方法, 其应用范围非常广泛, 跨越文理各科, 特别是社会科学用得最多, 如经济、管理、心理、教育等学科。

从内容上, 数理统计主要涉及参数估计 (点估计、区间估计)、假设检验 (参数检验、分布检验)、方差分析 (方差分析、正交设计) 和回归分析等内容。

关于如何分析问题、设计调查方案、制作调查问卷、选择调查样本、数据整理等统计学的基本问题和原理，以及统计学的不同流派，并不是本书所要涉及的内容，本章主要关注统计学关于数理统计，即数据分析和推断的部分。

对于给定一组数据，统计学可以摘要并且描述这份数据。这个用法称为描述统计。另外，观察者以数据的形态建立一个用以解释其随机性和不确定性的数学模型，用之来推论研究中的步骤及总体，这种用法称为推论统计。

统计的结果的显现方式主要有两种：一种是统计表，其优点是避免长篇文字叙述，便于阅读和对比，数据清晰具体；另一种是统计图，即采用点或线的位置和趋势、柱的长短、扇面面积等来形象地表达统计结果；两者也常常结合使用。

要注意的是，任何统计方法是否有效只有当该系统或是所讨论母体满足方法论的基本假设时才有意义。因此如果样品选择、统计方法和基本假设是错误的，误用统计学可能会导致描述面或是推论面严重的错误，因此对统计的结果应该通过其他方法小心验证。

11.1.2 Origin 中的统计分析

统计的方法和流派很多，除了基本的统计描述外，主要是各种推断统计。Origin 提供的方法包括：描述统计 (descriptive statistics)、假设检验 (hypothesis tests)、方差分析 (analysis of variance, ANOVA)。统计结果会形成统计报表，并提供了一系列方式来生成统计图形。

此外，OriginPro 即专业版提供了重复测量的方差分析 (Repeated-measures ANOVA)、生存分析 (Survival Analysis)，相对运转特性曲线 (relative operating characteristic curves, ROC curves)，功效和样本大小分析 (power and sample size computation) 和非参数检验 (nonparametric tests) 等功能。

本书重点讨论各种基本的统计方法，对于较特殊的统计方法及其原理，请读者阅读专业的统计学书籍。

除了以上的统计方法外，数据统计也可以采用一般的回归分析方法，详见前面章节的内容。

11.2 描述统计

11.2.1 准备数据

新建 Worksheet，导入 C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Statistics\body.dat 数据文件，这是一个学生的基本情况表。

在选中要分析数据的 Worksheet 之后，通过 Statistics 菜单下的命令，可以进行数据分析，输出分析报表，如图 11.1 和图 11.2 所示。

	A(X)	B(Y)	C(Y)	D(Y)	E(Y)
Long Name	name	age	gender	height	weight
Units					
Comments					
Sparklines					
1	Kate	12	F	146	42.2
2	Lose	12	F	150	55.4
3	Jane	12	F	136	33.2
4	Sophia	12	F	163	65
5	Grace	12	F	120	28.7
6	Tom	12	M	148	38
7	James	12	M	150	59
8	Sun	12	M	126	35.9
9	Barb	13	F	148	50.6
10	Alice	13	F	150	47.9
11	Susan	13	F	138	30.1
12	John	13	M	160	44.5
13	Joe	13	M	155	46.9
14	Mike	13	M	143	42.6
15	David	13	M	146	35.2
16	Judy	14	F	150	36.8

图 11.1 用于统计的原始数据

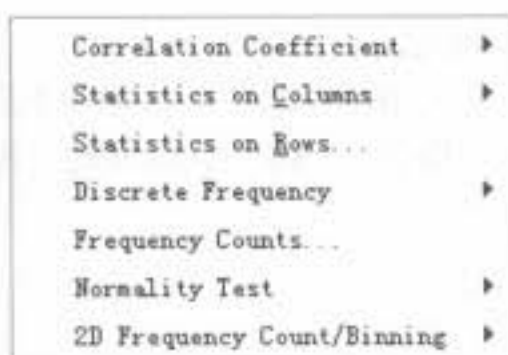


图 11.2 统计菜单命令

11.2.2 Statistics on Columns 列统计

选中 D 列(身高), 执行 Statistics → Statistics on Columns 命令之后, 可以打开 Statistics on Columns 对话框, 其中包括如下各项。

- (1) Input Data 项: 右边下拉框可选择是对当前列统计, 还是合并整个数据集统计;
- (2) Quantities to Compute 项: 打开 Moments 和 Quantiles 选中其中的复选框可以选择要计算和显示的统计项, Extreme Values 复选框: 是否计算显示极大/极小值;
- (3) Output Results 项: 输出图形或报表选项;
- (4) Plots: 作图, Histograms 复选框: 是否计算输出柱状统计图; Box Charts 复选框: 是否计算输出方框统计图。

设置完毕之后单击 OK 按钮, 生成相应的分析报表。其中包括 Notes (基本信息), Input Data (输入数据), 以及 Descriptive Statistics (描述统计结果), 如图 11.3 和图 11.4 所示。

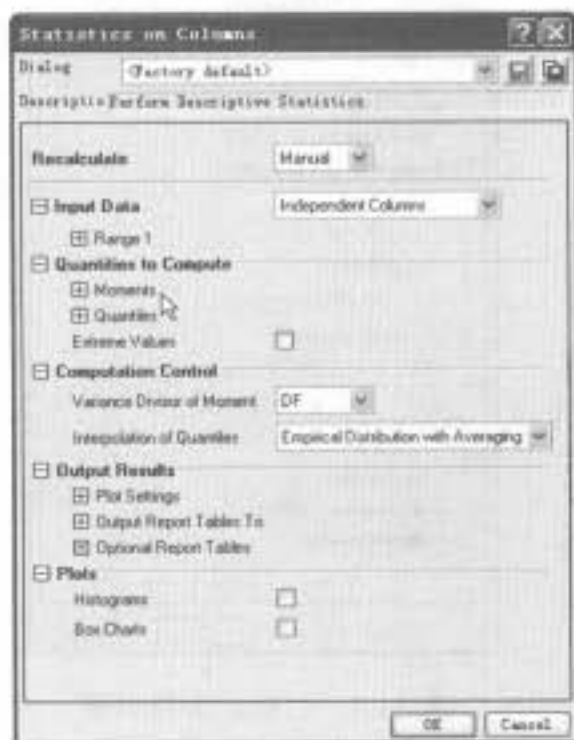


图 11.3 列统计参数设置

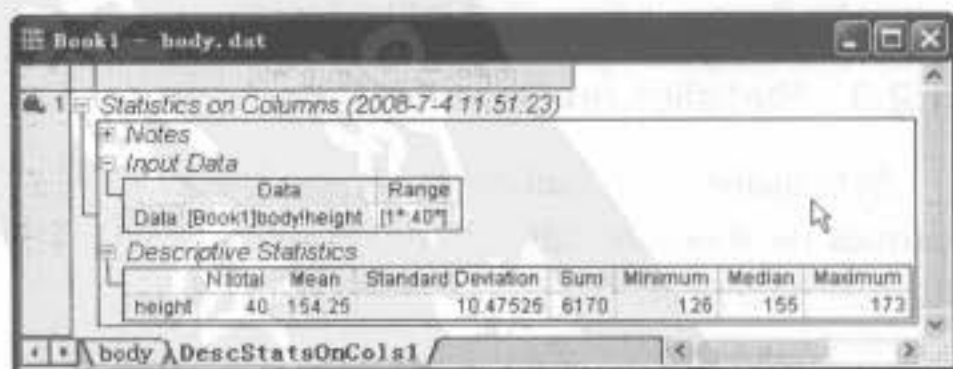


图 11.4 统计结果报表

在通过 Quantities to Compute 中的设置, Descriptive Statistics 项下可以显示如下统计项。

- (1) N Total: 数据点数目;
- (2) N Missing: 缺失的数据点数目;
- (3) Mean: 平均值;
- (4) Standard Deviation: 标准偏差;

- (5) SE of Mean: 平均值的标准误差;
- (6) Lower 95% CI of Mean: 平均值的 95%置信区间的下限;
- (7) Upper 95% CI of Mean: 平均值的 95%置信区间的上限;
- (8) Variance: 标准偏差的平方;
- (9) Sum: 总和;
- (10) Skeweness: 倾斜度数;
- (11) Kurtosis: 峰度;
- (12) Uncorrected Sum of Squares: 未改正的平方和;
- (13) Coefficient of Variance: 变异系数;
- (14) Mean absolute Deviation: 绝对偏差;
- (15) SD times 2: 标准偏差乘以 2;
- (16) SD times 3: 标准偏差乘以 3;
- (17) Geometric Mean: 几何平均数;
- (18) Geometric SD: 几何标准偏差;
- (19) Mode: 出现频率最高的数据;
- (20) Sum of Weights: 权重总和;
- (21) Minimum: 最小值;
- (22) Index of Minimum: 最小值的索引;
- (23) 1st Quartile (Q1): 插值操作时的 Q1 值 (25%);
- (24) Median: 插值操作时的 Q2 值 (50%);
- (25) 3rd Quartile (Q3): 插值操作时的 Q3 值 (75%);
- (26) Maximum: 最大值;
- (27) Index of Maximum: 最大值的索引;
- (28) Interquartile Range (Q3-Q1): 插值范围;
- (29) Rang (Maximum-Minimum): 极差;
- (30) Custom Percentile(s): 定制百分位数;
- (31) Percentile list: 是否列出百分位数。

11.2.3 Statistics on Rows 行统计

执行 Statistics → Statistics on Rows 命令之后, 可以打开 Statistics on Rows 对话框, 其中参数和统计结果与列统计类似, 如图 11.5 所示。

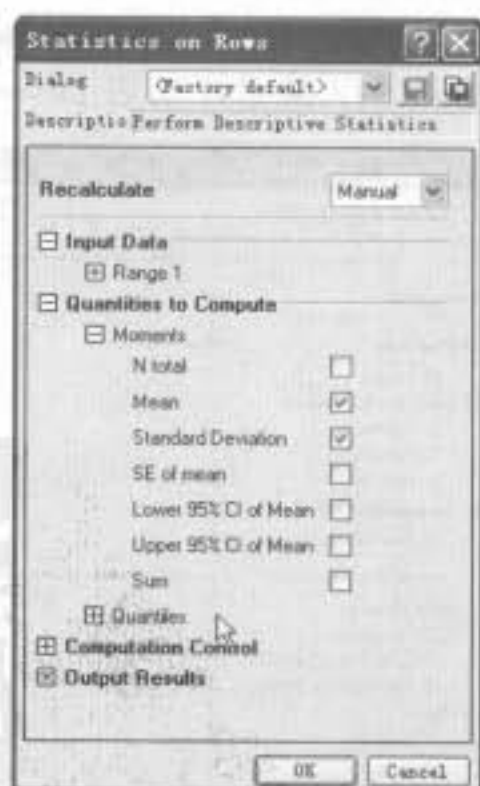


图 11.5 行统计参数设置

11.2.4 Frequency Counts 频率统计

频率/频度统计即将数据分成一系列区间, 然后分别计算符合区间的数值。使用 Statistics → Frequency Count 打开对话框。

主要参数包括如下内容。

- (1) Input: 数据源;
- (2) From Minimum: 区间最小值;
- (3) To Maximum: 区间最大值;

- (4) Step by: 产生区间段 (bins) 的方法; 包括 Increment (增加步长) 和 Intervals (间隔);
- (5) Include Outliers < Minimum: 异常值 (Outliers) 小于最小值时加入到最小区间段;
- (6) Include Outliers >= Maximum: 异常值大于最大值时加入到最大区间段;
- (7) Bin Center: 区间段中值;
- (8) Bin End: 区间段结束值;
- (9) Count: 每个区间段计数;
- (10) Culmulative Count: 积累计数, 即将前面的再累加;
- (11) Relative Frequency: 相对频度;
- (12) Cumulative Frequency: 积累频度;
- (13) Output: 输出目标工作表。

使用学生信息表中身高 (D 列) 的数据进行频度分析从中我们可以发现身高在 150cm~160 cm 间的人数最多, 160cm~170cm 的为次多, 如图 11.6 和图 11.7 所示。

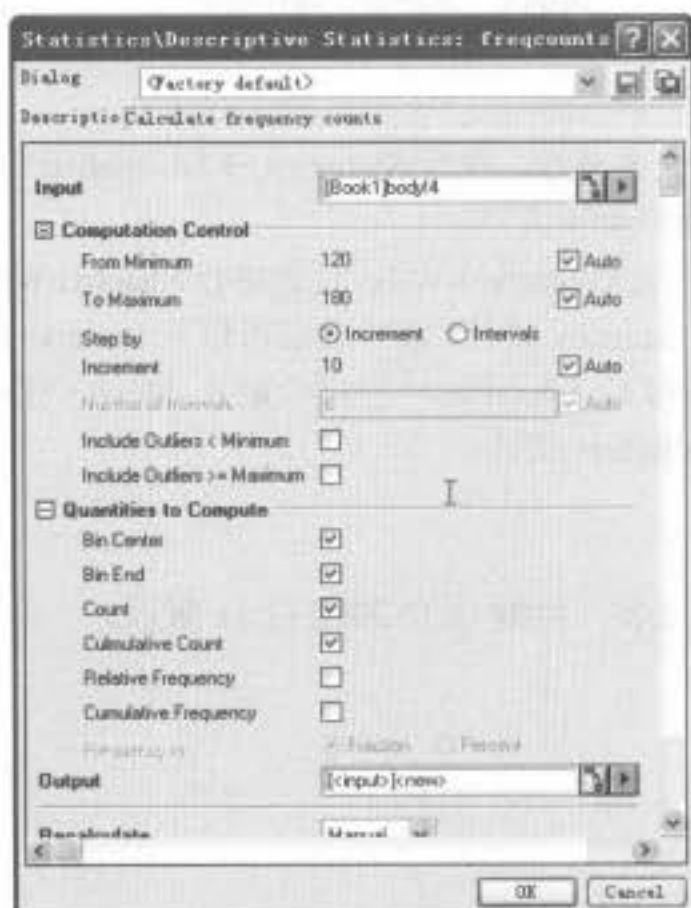


图 11.6 频度统计对话框

	Bin Center	Bin End	Counts	CumulCounts
Comments	Frequency Counts of height			
Long Name	Bin Center	Bin End	Count	Cumulative Count
1	125	130	2	2
2	135	140	2	4
3	145	150	6	10
4	155	160	16	26
5	165	170	12	38
6	175	180	2	40
7				
8				
9				

图 11.7 统计结果

11.2.5 Discrete Frequency 离散频率统计

离散频率统计, 可以对各个数据段中数据出现的频率进行统计。执行 Statistics → Discrete Frequency 命令之后, 可以打开 Statistics \Descriptive Statistics: discfreqs 对话框, 其中包括:

- (1) Frequency 复选框: 是否统计频率;
- (2) Percent 复选框: 是否统计每个频率的百分比;
- (3) Cumulative Percent 复选框: 是否统计频率统计的累积百分比;
- (4) Case Sensitive 复选框: 是否区分大小写。

设置完毕之后单击 OK 按钮, 在所选择的 Worksheet 中生成相应的分析结果, 如图 11.8 和图 11.9 所示。

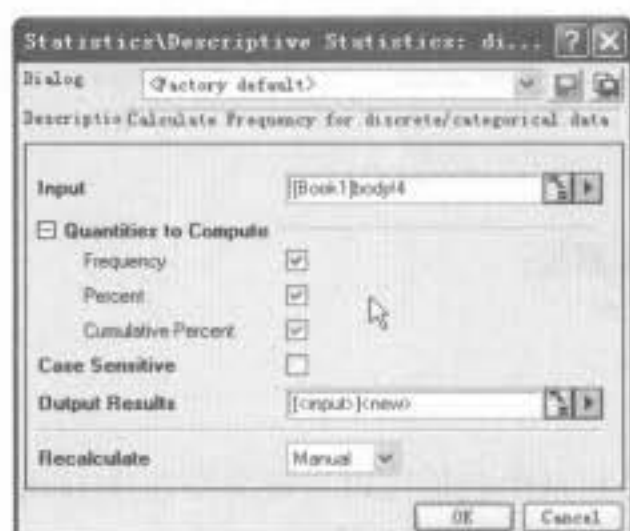


图 11.8 离散频度统计

Comments	Data	Frequencies	Percent	Cumulative Percent
1	126	1	0.025	0.025
2	128	1	0.025	0.05
3	136	1	0.025	0.075
4	138	1	0.025	0.1
5	143	1	0.025	0.125
6	146	2	0.05	0.175
7	148	3	0.075	0.25
8	150	4	0.1	0.35
9	153	5	0.125	0.475
10	155	3	0.075	0.55
11	158	4	0.1	0.65
12	160	5	0.125	0.775
13	163	3	0.075	0.85
14	165	1	0.025	0.875
15	168	3	0.075	0.95
16	170	1	0.025	0.975
17	173	1	0.025	1

图 11.9 离散频度统计结果

11.2.6 Normality Test 正态检验

正态检验可以测试所统计的数据分布是否符合正态分布。执行 Statistics → Normality Test 命令之后，可以打开 Normality Test 对话框，其中包括如下几项。

(1) Quantities to Compute: 正态检验的方法选择，包括 Shapiro-Wilk: 是否进行 Shapiro-Wilk 统计; Kolmogorov-Smirnov: 是否进行 Kolmogorov-Smirnov 统计，选中之后可以从 Parameters 下拉框中选择参数来源 Estimated (从输入数据中获得)、Specified (用户指定)、Mean (平均值) 和 Variance (异常值); Lilliefors: 是否进行 Lilliefors 统计;

(2) Output Results: 输出选项;

(3) Plot: 作图选项。

设置完毕之后单击 OK 按钮，生成相应的分析报表，如图 11.10 和图 11.11 所示。



图 11.10 正态检验参数设置



图 11.11 正态检验结果

11.2.7 Correlation Coefficient 相关系数统计

执行 Statistics → Correlation Coefficient 命令之后, 可以打开 Statistics\Descriptive Statistics:corrcoef 对话框, 其中可以设置的项, 除了基本项目外, 还有以下内容:

- (1) Pearson: 是否计算显示 Pearson 积差相关系数;
- (2) Spearman: 是否计算显示 Spearman 秩相关系数;
- (3) Kendall: 是否计算显示 Kendall 系数;
- (4) Scatter plots: 是否根据数据制作点线图;
- (5) Add Confidence Ellipse: 是否计算输出置信度;
- (6) Confidence Level for Ellipse (%): 设置置信度;
- (7) Exclude Missing Values: 可以选择 Pairwise (成对) 还是 Listwise (成列) 排除异常数据。

在 Input 选择 D 列 (身高) 和 E 列 (体重), 然后单击 OK 按钮, 生成相应的分析报表, 如图 11.12 和图 11.13 所示。



图 11.12 相关系数统计对话框

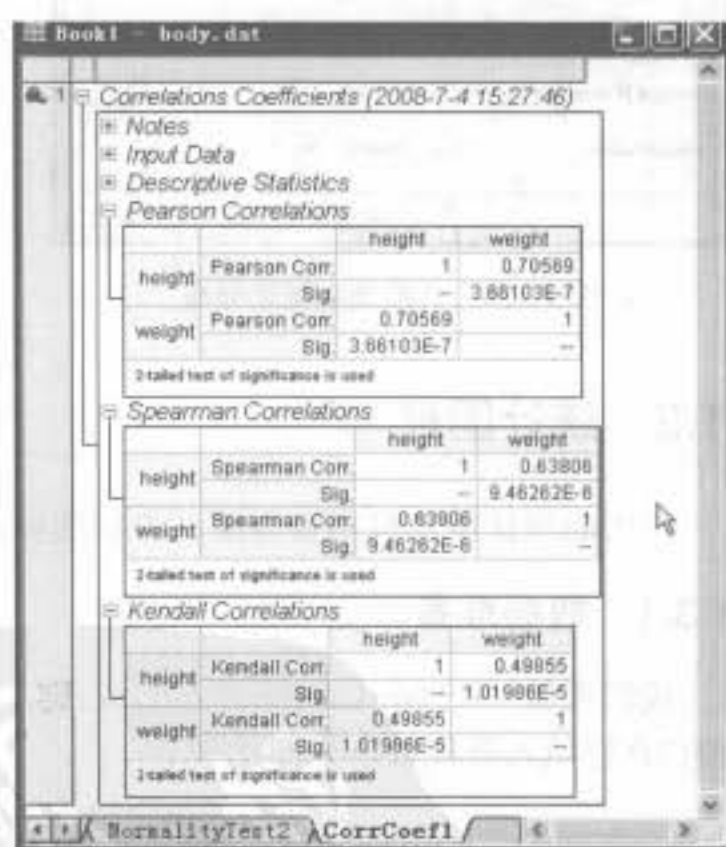


图 11.13 相关系数统计结果报表

11.2.8 2D Frequency Count/Binning 二维频率统计分布图

二维频率统计分布统计可以统计的二维数据集的数据频率, 在二维直角坐标系中显示出来。执行 Statistics → 2D Frequency Count/Binning 命令之后, 可以打开 Statistics \Descriptive Statistics: TwoDBinding 对话框, 其中包括如下内容。

- (1) X 项: 可以设置 X 轴的统计范围, 包括 From Minimum (最小值)、To Maximum (最大值)、Step by (增长方式, 包括 Increment (递增) 和 Intervals (间隔) 2 种方式)、Increment (递增值)、Number of Intervals (间隔值)、Include Outliers<Minimum (统计范围下限外的数据是否小于最小值) 和 Include Outliers>=Maximum (统计范围上限外的数据是否大于最大值);

- (2) Y 项：可以设置 Y 轴的统计范围，参照 X 项；
 (3) 3D Bars 复选框：是否显示统计数据的三维条形图；
 (4) Image Plot 复选框：是否以图形方式显示统计数据。

设置完毕之后单击 OK 按钮，生成相应的 Matrix 表，如图 11.14 和图 11.15 所示。



图 11.14 二维频率统计分布

	1	2	3	4	5
1	1	0	0	0	0
2	1	2	2	3	0
3	0	0	2	9	5
4	0	0	2	4	4
5	0	0	0	0	3
6	0	0	0	0	0

图 11.15 分析结果报表

11.3 统计图形

常用的统计图形包括直方图、方框图和质量控制图等。

11.3.1 数据准备

我们先做一个 Worksheet，按鼠标右键用填充命令在第 A 列的 10 行填入行号，在 B、C 2 列的 10 行填入随机数，如图 11.16 所示。

	A()	B()	C()
Long Name			
Units			
Comments			
1	1	0.86528	0.31848
2	2	0.39649	0.00595
3	3	0.44901	0.80696
4	4	0.77041	0.48388
5	5	0.43139	0.74349
6	6	0.11343	0.02226
7	7	0.12061	0.59422
8	8	0.00387	0.37465
9	9	0.21913	0.38224
10	10	0.66058	0.12831
11			
12			
13			

图 11.16 原始数据

11.3.2 Histogram 直方图

选中 Worksheet 的 2 个 Y 列, 通过 **Plot** → **Statistics** → **Histogram** 命令, 即可生成直方统计图。

这个图形可以清楚地比较不同区间里, 数据的出现次数。右键单击图形, 选择 **Go to Bin Worksheet** 命令, 可以弹出一个统计表。另外, 选择 **Properties...** 命令可以修改图形的外观, 如图 11.17 和图 11.18 所示。

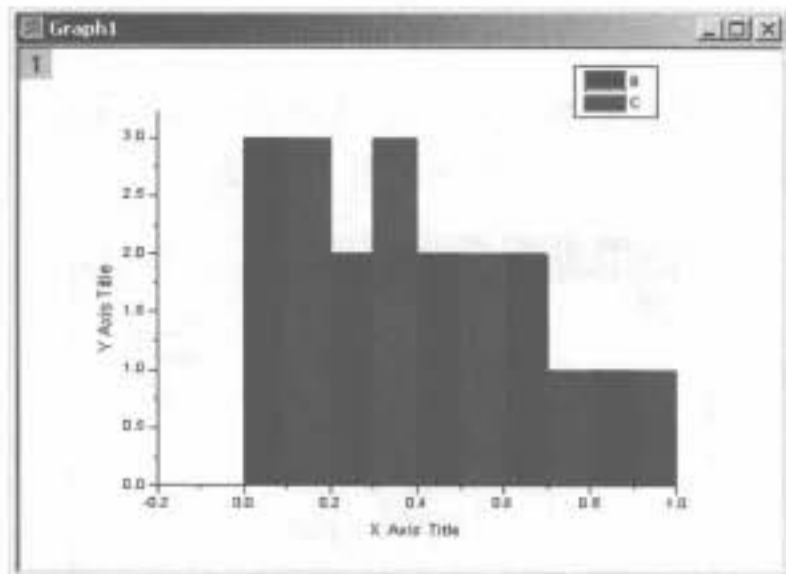


图 11.17 直方图

	BinCenters	Counts(Y)	Cumulative	Cumulative
Comments				
Long Name	Bin Center	Counts	Cumulative	Cumulative
1	-0.1	0	0	0
2	0.1	3	3	30
3	0.3	2	5	50
4	0.5	2	7	70
5	0.7	2	9	90
6	0.9	1	10	100
7				
8				
9				
10				
11				
12				
13				
14				

图 11.18 统计结果

在这个表里面:

- (1) Book1_B Bins 为 B 列的图形的统计项;
- (2) Bin Center 为 Y 轴刻度, 表示统计数据区间;
- (3) Counts 为第一个方框图中, 在 Bin Center 所示的区间里出现的个数;
- (4) 第 3 列 Cumulative 项积累计数;
- (5) Book1_C Bins 则为 C 列的图形的统计项。

双击图形对象打开统计直方图 Plot Details 参数设置框, 其中最重要的是 Curve 曲线选项, 例如选中 Normal 正态图形然后单击 OK 按钮, 则会在原直方图上面再加入一条正态分布曲线, 如图 11.19 所示。



图 11.19 添加分布曲线

11.3.3 Histogram+Probabilities 概率直方图

选中 Worksheet 的 B 列, 选择 Plto → Statistics Graphs → Histogram+Probabilities 命令, 即可生成概率直方图。

其中上面图的为数据的累积出现个数, 下面的则为各个区间里数据出现的次数。另外, 右键单击图形, 选择 Go to Bin Worksheet 命令, 可以弹出一个与直方图一样的统计表。

11.3.4 Stacked Histogram 多层直方图

选中 Worksheet 的 2 个 Y 列 (当然, 你也可以选择任意多个 Y 列), 选择 Plto → Statistics Graphs → Stacked Histogram 命令, 即可生成多层直方图, 如图 11.20 和图 11.21 所示。

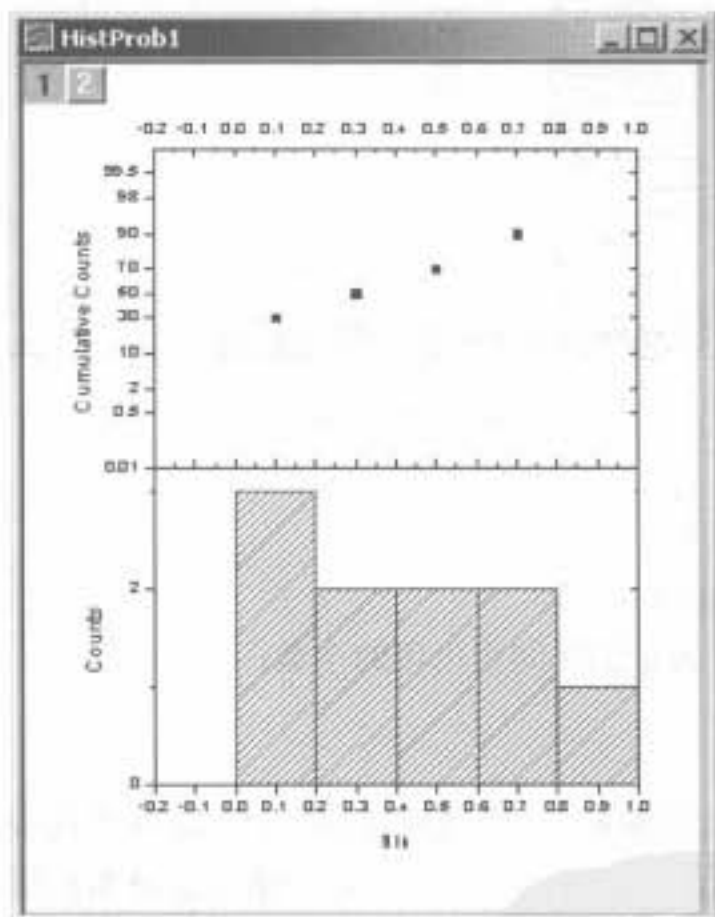


图 11.20 概率直方图

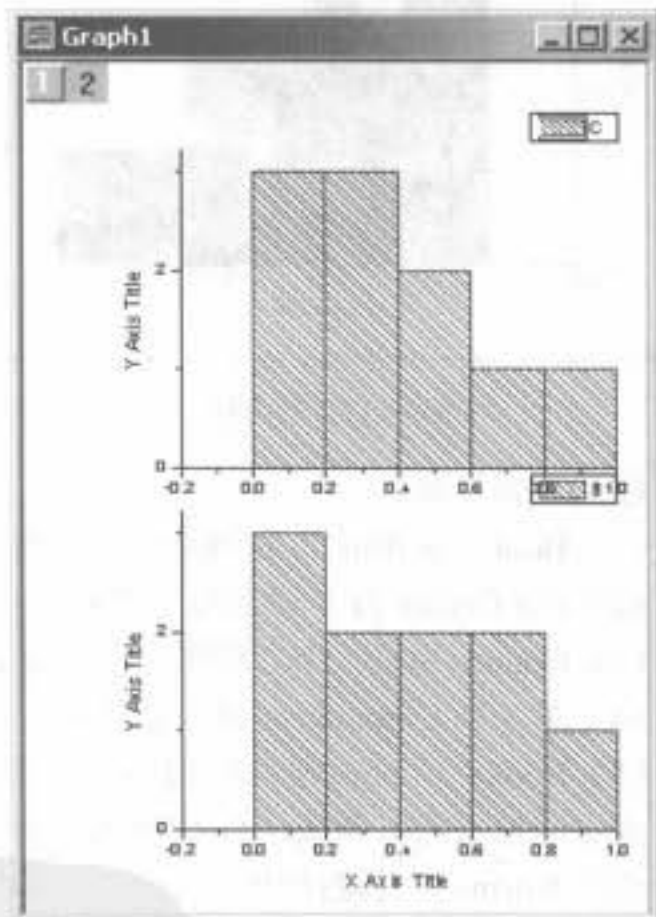


图 11.21 多层直方图

11.3.5 Box Chart 方框图

选中 Worksheet 的 2 个 Y 列, 通过 Plto → Statistics Graphs → Box Chart 命令, 即可生成方框统计图。

右键单击图形, 选择 Go to Bin Worksheet 命令, 可以弹出一个跟直方图一样的统计表, 如图 11.22 所示。

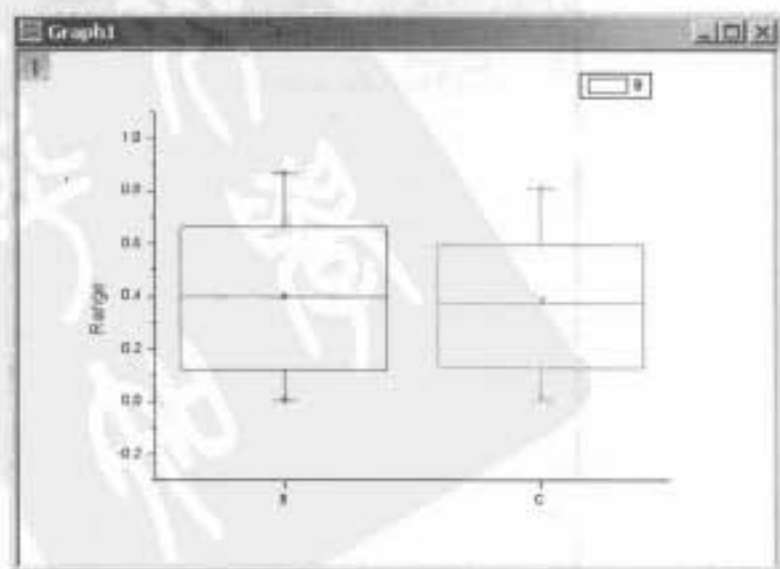


图 11.22 方框图

11.3.6 QC (X Bar R) Chart 质量控制图

选中 Worksheet 的 B 列, 选择 Plto \rightarrow Statistics \rightarrow QC (X Bar R) Chart 命令, 会弹出 X Bar R Chart 对话框, 如图 11.23 所示。

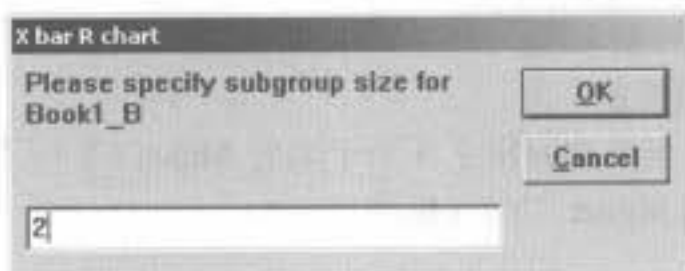


图 11.23 参数设置

这个对话框可以设定数据子集的大小, 本例中输入 2 然后单击 OK 按钮, 即可生成质量控制图 (Quality Control Chart), 同时弹出质量控制图的统计表, 如图 11.24 和图 11.25 所示。

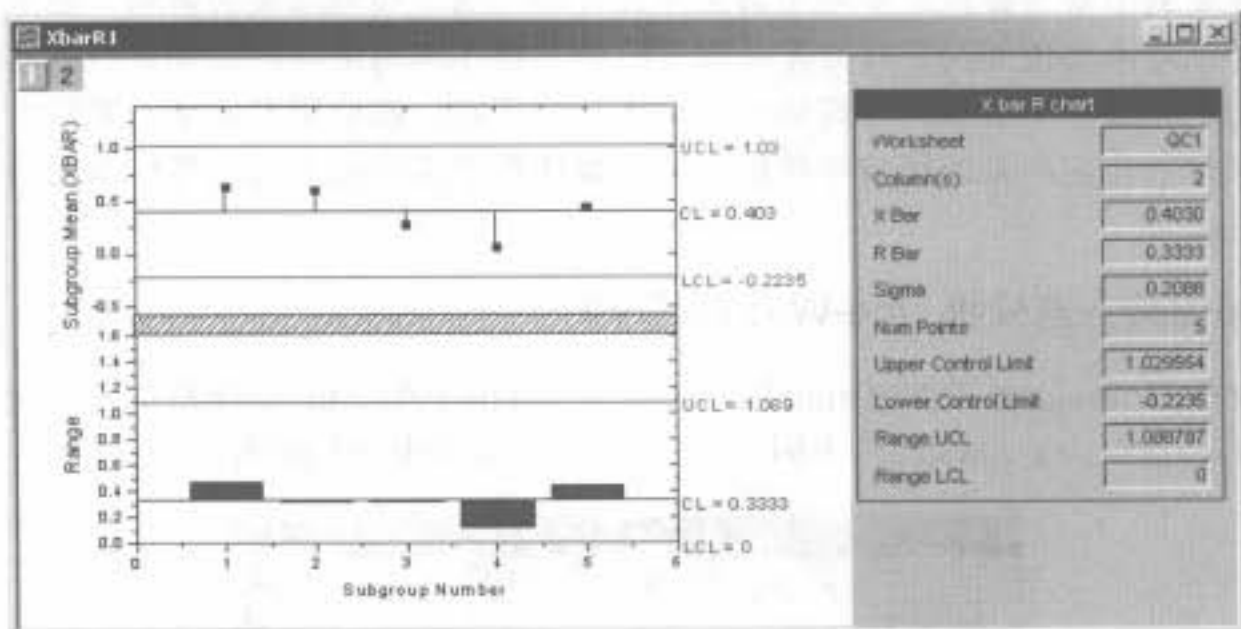


图 11.24 质量控制图

QC1				Make QC Chart	
	Mean(Y)	R(Y)	Sigma(Y)	Worksheet	Book1
1	0.63089	0.46879	0.33149	Group Size	2
2	0.60971	0.3214	0.22727	Num Sigma	3.0
3	0.27241	0.31796	0.22483	Column 1	2
4	0.06224	0.11673	0.08254	Column 2	2
5	0.43986	0.44145	0.31215	Graph Window	XbarR1
6					
7					
8					
9					

图 11.25 统计结果报表

质量控制图里面, 可以见到统计项如下。

- (1) Worksheet: 统计表名;
- (2) Column(s): 列号;
- (3) X Bar: 等于 CL (Control Limit), 控制水平;
- (4) R Bar: 等于 Range 的 CL, 区域控制水平;

- (5) Sigma: 即 σ , 标准偏差;
- (6) Num Points: 数据点的个数, 等于子集的个数;
- (7) Upper Control Limit (UCL): 控制上限;
- (8) Lower Control Limit (LCL): 控制下限;
- (9) Range UCL: 区域控制上限;
- (10) Range LCL: 区域控制下限。

而质量控制图的统计表里面则列出了各个子集的 Mean (Y) (平均值); R (Y) (极差, 即最大值与最小值之差) 和 Sigma (Y) (标准偏差)。

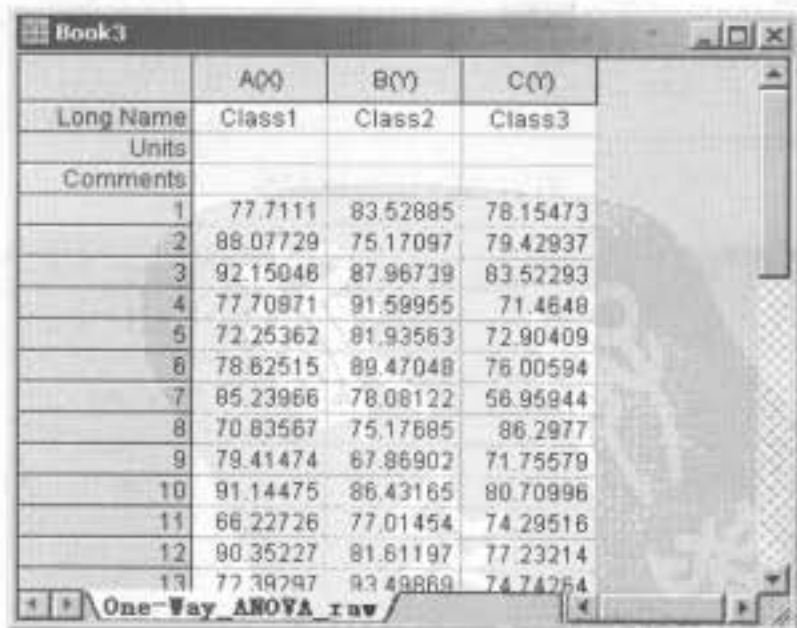
11.4 方差分析

11.4.1 方差分析 analysis of variance, ANOVA

在科学实验中常常要探讨不同实验条件或处理方法对实验结果的影响。通常是比较不同实验条件下样本均值间的差异方差分析是检验多组样本均值间的差异是否具有统计意义的一种方法。如医学界研究几种药物对某种疾病的疗效; 农业研究土壤、肥料、日照时间等因素对某种农作物产量的影响不同饲料对牲畜体重增长的效果等, 都可以使用方差分析方法去解决。

11.4.2 单因素方差分析 One-Way ANOVA

使用数据 C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Statistics\ANOVA 目录下的数据文件: One-Way_ANOVA_raw.dat 作为例子进行方差分析, 如图 11.26 所示。



	A(Y)	B(Y)	C(Y)
Long Name	Class1	Class2	Class3
Units			
Comments			
1	77.7111	83.52885	78.15473
2	88.07729	75.17097	79.42937
3	92.15048	87.96739	83.52293
4	77.70871	91.59955	71.4648
5	72.25362	81.93563	72.90409
6	78.62515	89.47048	76.00594
7	85.23966	78.08122	58.95944
8	70.83567	75.17685	86.2977
9	79.41474	67.86902	71.75579
10	91.14475	86.43165	80.70996
11	66.22726	77.01454	74.29516
12	80.35227	81.61197	77.23214
13	77.39297	83.49869	74.74264

图 11.26 原始数据

通过 Statistics → ANOVA → One-way ANOVA 命令, 可以打开 ANOVAOneWay 对话框, 对分析参数进行设置, 其中包括如下内容。

- (1) Input 下拉框: 输入数据的方式;
- (2) Factor 输入框: 要分析的要素;
- (3) Data 输入框: 要分析的数据;

- (4) Descript Statistics 复选框: 是否计算和显示描述统计的统计数据;
- (5) Significance Level 输入框: 指定分析的显著性水平;
- (6) Tukey 复选框、Bonferroni 复选框、Dunn-Sidak 复选框、Fisher LSD 复选框、Scheffe' 复选框、Holm-Bonferroni 复选框、Holm-Sidak 复选框: 选择不同的平均值的比较方式;
- (7) Levenell 复选框、Levene ()^2 复选框、Brown-Forsythe 复选框: 选择不同的检验方差是否相等的方式;
- (8) Actual Power 复选框: 可以选择是否显示检验的实际概率;
- (9) Hypothetical Power 复选框: 可以选择是否显示检验的假设概率;
- (10) Significance Level 输入框: 指定分析的显著性水平;
- (11) Hypothetical Sample Size(s)输入框: 假设数据的数量。

设定完毕后单击 OK 按钮即可进行检验并得到结果, 除了那些我们再前面讨论过的统计项之外, 其中

Null Hypothesis: The means of all levels are equal
 Alternative Hypothesis: The means of one or more levels are different
 At the 0.05 level, the population means are significantly different.
 There is no enough information to draw conclusion.

为主要的分析结论, 如图 11.27 和图 11.28 所示。

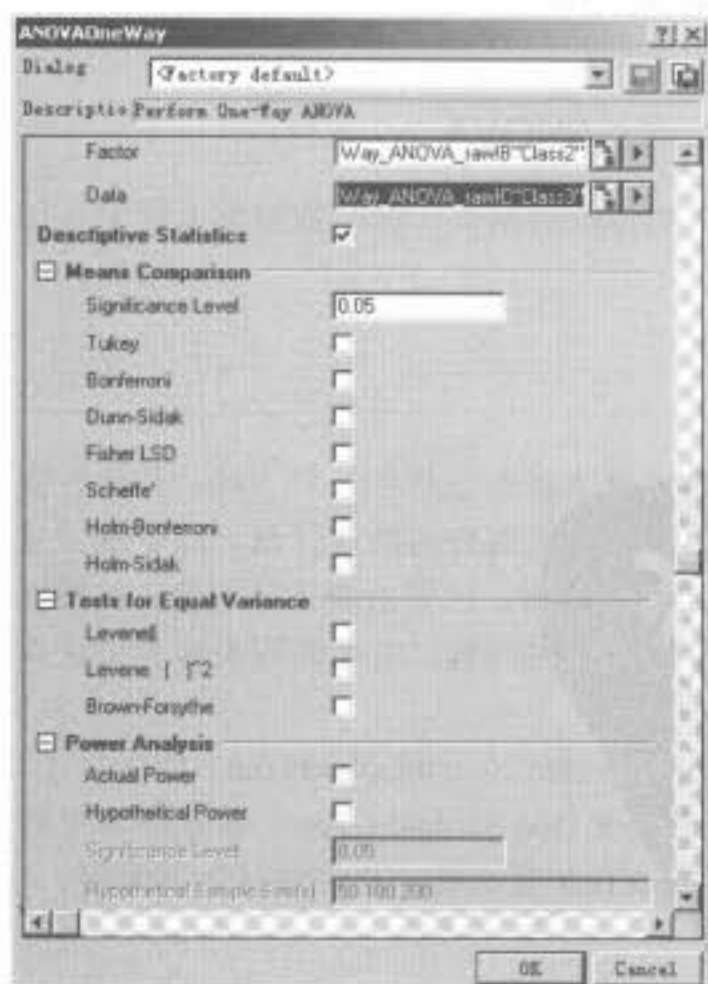


图 11.27 单因素方差分析参数设定

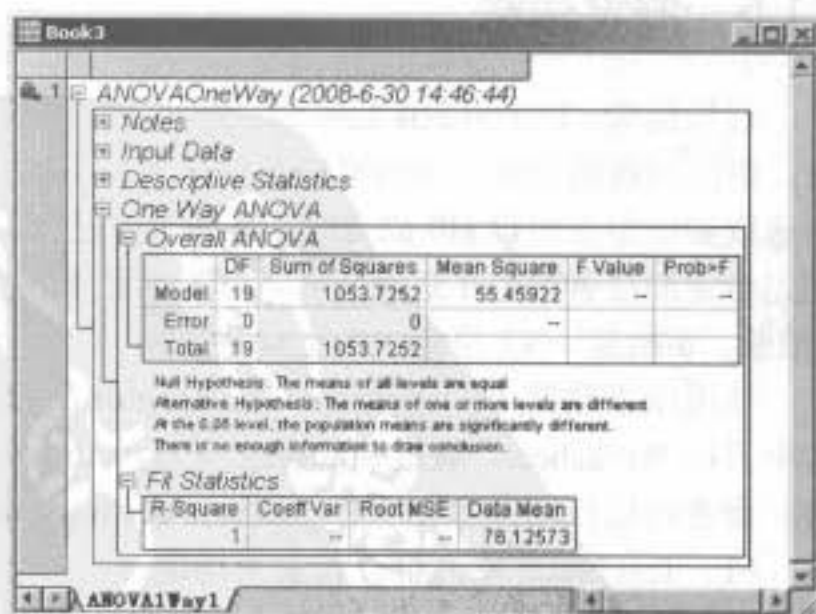


图 11.28 单因素方差分析报表

11.4.3 双因素方差分析 Two-Way ANOVA

使用数据 C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Statistics\ANOVA 目录下的数据文件: Two-Way_ANOVA_raw.dat 作为例子进行方差分析。

通过 Statistics → ANOVA → Two-way ANOVA 命令，可以打开 Two-way ANOVA 对话框。其设置跟单因子方差分析设置基本相同，得到的结果项也差不多，不再重复，如图 11.29 所示。

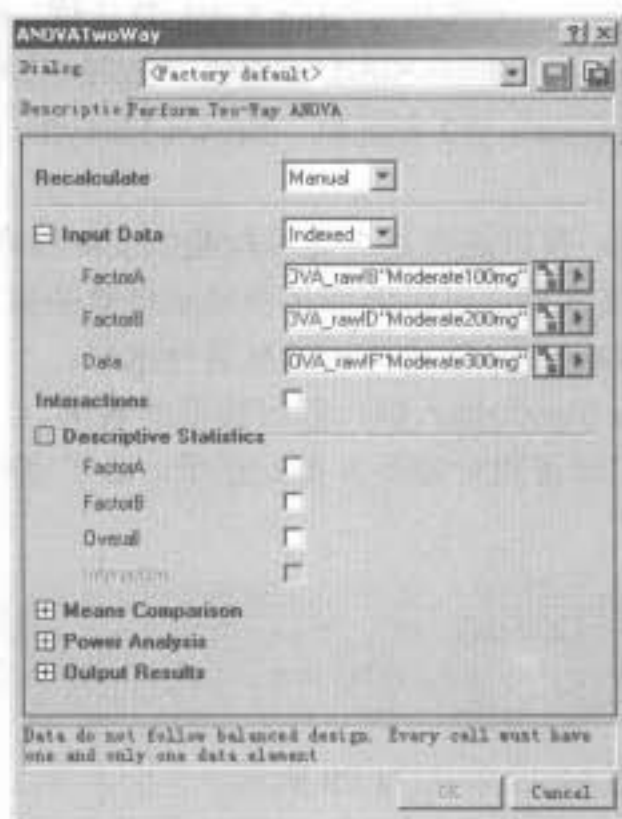


图 11.29 双因素方差分析设置

11.4.4 重复测量的方差分析 Repeated-measures ANOVA

与普通方差分析基本上一样，主要用于比较 2 个相似的数据集，这些数据集必须是在每一个水平上面都存在着相同的样本大小。

11.5 假设检验

假设检验 (Hypothesis Testing) 根据一定假设条件由样本推断总体的一种方法。具体作法是：根据问题的需要对所研究的总体作某种假设，记作 H_0 ；选取合适的统计量，这个统计量的选取要使得在假设 H_0 成立时，其分布为已知；由实测的样本，计算出统计量的值，并根据预先给定的显著性水平进行检验，作出拒绝或接受假设 H_0 的判断。常用的假设检验方法有 t-检验、u-检验、 χ^2 检验、F-检验等。

使用以下数据 (C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Statistics\body.dat) 作为例子，选中目标 Worksheet，通过 Statistics → Hypotheses Testing → One Sample t-Test (独立样本 T 检验) 命令可以打开 Statistics\Hypothesis Testing:OneSampleTest 对话框，其中包括如下内容。

- (1) Test Mean 输入框：设置平均值；
- (2) Null Hypothesis 输入框：虚假设值；
- (3) Alternate Hypothesis 单选框：用于设定是双边 ($\text{Mean} \neq 0$) 还是单边 ($\text{Mean} > 0$ 或 $\text{Mean} < 0$) t 检验；
- (4) Confidence Interval(s) 复选框：可以设定 Confidence Level(s) in % (置信度区间)；
- (5) Confidence Level(s) in % 输入框：设置置信度区间；
- (6) Actual Power 复选框：可以选择是否计算 t 检验的实际概率；

- (7) Significance Level 输入框: 设定显著性水平;
- (8) Hypothetical Power 复选框: 设置是否计算功效;
- (9) Hypothetical Sample Size(s)输入框: 设置样本大小;
- (10) Histograms 复选框: 是否计算输出柱状统计图;
- (11) Box Charts 复选框: 是否计算输出方框统计图。

设定完毕后单击 OK 按钮即可进行检验并得到结果, 除了那些我们再前面探讨过的统计项之外, 其中

```
Null Hypothesis: Mean = 0
Alternative Hypothesis: Mean <> 0
age: At the 0.05 level, the population mean is significantly different with the test mean (0)
```

为分析的结论, 如图 11.30 和图 11.31 所示。

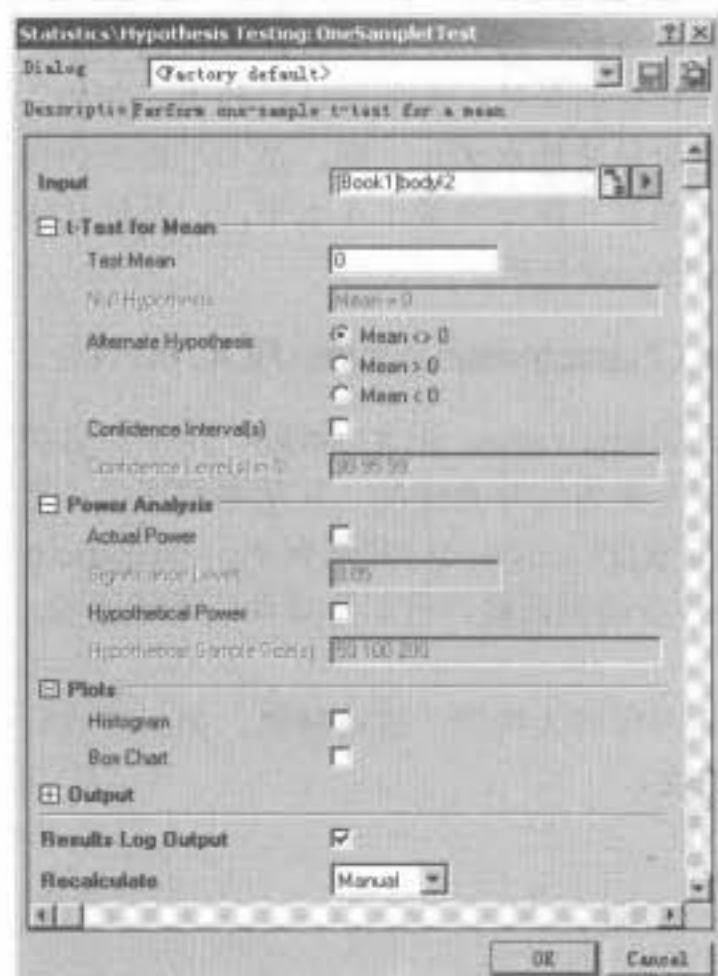


图 11.30 假设检验对话框

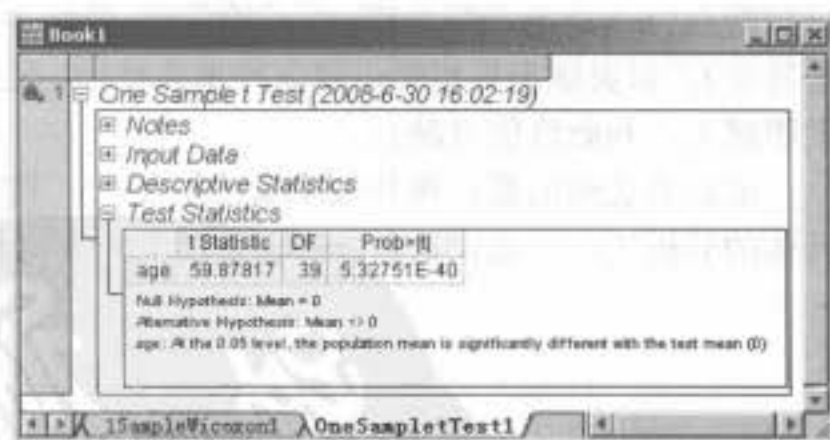


图 11.31 假设检验分析结果

11.6 其他分析方法简介

11.6.1 非参数检验 nonparametric tests

非参数检验是与参数检验(例如假设检验)相对应的, 参数检验是基于数据存在一定分布的假设, 如 t 检验要求总体符合正态分布, F 检验要求误差呈正态分布且各组方差整齐, 等等。但许多调查或实验所得的科研数据, 其总体分布未知或无法确定, 这时做统计分析常常不是针对总体参数, 而是针对总体的某些一般性假设(如总体分布), 这类方法称非参数统计(Nonparametric tests)。

非参数统计方法简便，适用性强，但检验效率较低，应用时应加以考虑。

11.6.2 生存分析 Survival Analysis

一些医学事件所经历的时间：从开始观察到事件发生的时间，不是短期内可以明确判断的，例如，乳腺癌病人术后生存时间；幼儿乳牙萌出的时间；白血病病人化疗后缓解持续的时间；两种方法治疗某慢性病产生疗效的时间。生存分析就是针对这类生存资料的分析方法。

生存分析是一种研究既有事件的发生时间又有事件结局资料的统计学方法，强调所研究问题的结果变量是某一事件发生的时间。其基本目的包括：描述生存过程、比较不同人群的生存过程、分析生存时间的相关因素等。

11.6.3 功效和样本大小分析 power and sample size computation

统计功效 (Statistical Power) 是统计学中的一个重要概念，也是一个十分有用的测度指标。简单地说，统计功效是指，在假设检验中，在拒绝原假设后，接受正确的替换假设的概率。统计功效大量地应用于医学、生物学、生态学和人文社会科学等方面的统计检验中。例如，在国外抽样调查设计方案中，对统计功效的要求如同对显著性水平 α 一样，是不可缺少的内容。统计功效的大小取决于多种因素，包括：检验的类型、样本容量、 α 水平，以及抽样误差的状况。统计功效分析应是上面诸因素结合在一起的综合分析。

11.6.4 受试者工作特性曲线 Receiver Operating Characteristic curves, ROC curves

受试者操作特性曲线 (Receiver Operating Characteristic curve, ROC 曲线)，用于二分类判别效果的分析与评价，一般自变量为连续变量，因变量为二分类变量。其基本原理是：通过判断点 (cutoff point/cutoff value) 的移动，获得多对灵敏度 (sensitivity) 和误判率 (1-Specificity 特异度)，以灵敏度为纵轴，以误判率为横轴，连接各点绘制曲线，然后计算曲线下的面积，面积越大，判断价值就越高。

最后要说明的是，统计技术看似不复杂，其实其内容博大精深，很难精通，如果要进行具体的分析工作，建议认真参考相关的专业书籍和论文。

本章要点

- 图像导入
- 图像调整
- 图像转换
- 图像分析
- 图像输出

12.1 数字图像处理概述

数字图像处理 (Digital Image Processing), 简单来说, 是指利用数字计算机或其他数字硬件, 对从图像信息转换而来的电信号进行某些数学运算以期达到预想的结果的过程。

这个过程可能涉及一系列的子过程, 包括: 图像获取、表示和表现 (Image Acquisition Image, Representation and Presentation)、图像增强 (Image Enhancement) 即从某一层面上改善图像质量、图像复原 (Image Restoration) 即根据图像品质下降的原因对图像进行校正、图像分割 (Image Segmentation) 即把图像分成各种区域、图像压缩 (Image Compression)、彩色图像处理 (Color Image Processing)、图像形态学 (Morphological Processing) 提取图像的形态分量等。总之, 就是要实现图像的获取、分析处理, 最后根据一定目的进行利用。

图像的获取, 并不是简单照相的过程, 照相过程其实就是可见光成像, 其他可成像的方法还包括 X 射线成像、红外成像、微波成像、声波/超声波成像、遥感成像、显微镜/电子显微镜成像、计算机模拟成像等。可见, 图像的来源是多种多样的。

Origin 8.0 版本, 首次提供了大量工具用于处理和分析数字化图像 (raster images, 光栅图像, 点阵图, 位图), 主要功能包括如下几项。

- (1) 图像导入, 要注意格式的支持;
- (2) 图像分析, 基本图像信息;
- (3) 图像调整, 如亮度、对比度、色调、色彩平衡等;
- (4) 图像转换, 色彩模式的转换、图像向矩阵的转换等;
- (5) 几何变换, 调整大小、剪切等;
- (6) 算术变换, 算术运算、递增扣除等;
- (7) 空间滤镜, 噪声、锐化、边缘等;
- (8) 图像的输出。

12.2 图像导入

图像的处理，主要在 Matrix 矩阵窗口中进行。

要导入图像，可以先通过 File → New 命令新建一个 Matrix，然后通过 File → Import 命令导入图像，这里以 C:\Program Files\OriginLab\Origin8\Samples\Image Processing and Analysis\Car.bmp 为例。使用这个图像能够较好地展现 Origin 图像处理的功能。

在导入图像的 impImage 对话框里，只要勾上 Result Log Output 这个选项，在导入图像的同时就会在 Result Log 里面输出图像的基本信息，如图 12.1 和图 12.2 所示。

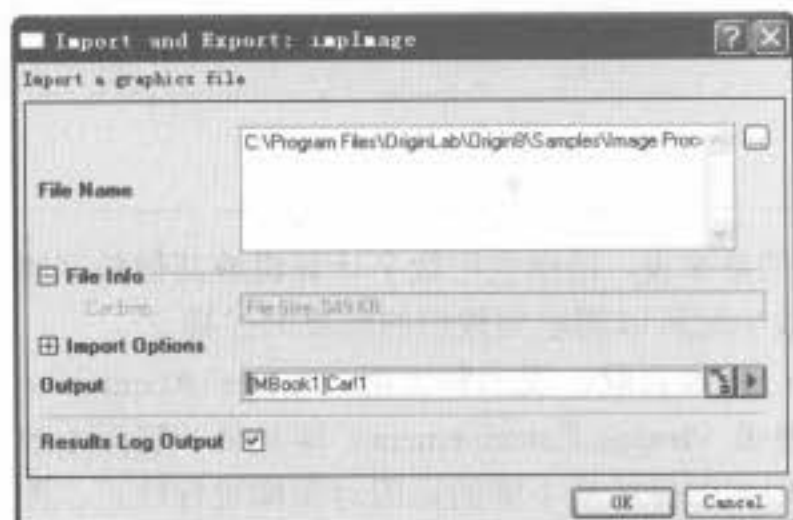


图 12.1 图像导入对话框



图 12.2 利用 Result Log 窗口获取图像的基本参数

这样我们就把一个图像导入到了 Matrix 里面，如图 12.3 所示。



图 12.3 导入图像到矩阵窗口

Origin 目前支持的格式有 BMP、GIF、JPEG、PCX、PNG、TGA、PSD、TIF、WMF 等常用格式。

虽然通常是使用 Matrix 来进行图像运算的，但你也可以把图像转用其他方式来操作。可以直接通过 Plot → Image → Image Plot 转成 Graph，也可以通过 Matrix → Convert to Worksheet 这个工具转换为 Worksheet，如图 12.4 所示。



图 12.4 将图像转换成 Graph 图形

12.3 图像调整

在 Matrix 里，首先导入图像，要对图像进行调整，只要选中目标 Matrix，然后执行 Image → Adjustment 子菜单下的命令设置参数后，单击 OK 按钮即可，如图 12.5 所示。

可供图像调整使用的命令包括如下几项。

- (1) Brightness: 亮度调节;
- (2) Contrast: 对比度调节;
- (3) Gamma: 色彩强度调节;
- (4) Hue: 色调调节;
- (5) Invert: 将图像色彩调节为反相;
- (6) Saturation: 饱和度调节;
- (7) Histcontrast: 直方图对比;
- (8) Histequalize: 直方图均衡;
- (9) Auto Level: 自动色阶;
- (10) Color Level: 色阶调节;
- (11) Function LUT: 通过表格数组调节强度;
- (12) Leveling: 水平调节;
- (13) Balance: 色彩平衡;
- (14) Color Replace: 替换颜色。



图 12.5 调整色阶

它们的具体参数设置都在对话框中进行设置，如果一些参数显示不出来，需要用鼠标在对话框右下角进行拖曳调整对话框的大小来显示。参数设置过程比较简单，主要是一些选择（调整的方法）和数值（使用鼠标拖曳或键盘输入），具体的设置参数根据即时预览的效果进行确定，如果是多个图像处理，则可能要使用同一参数，另外，也可以通过 Output Image 和 Report 将处理结果输出为新的图像或报表。

12.4 图像转换

要对图像进行转换操作，将图像导入到 Matrix 窗口中，选中目标 Matrix，然后执行 Image → Conversion 子菜单下的命令设置参数后，单击 OK 按钮即可，如图 12.6～图 12.8 所示。

可供图像转换使用的命令包括如下几项。

(1) Convert to Data: 可以将图像转换为数据（矩阵向量）形式显示。

转换后的数据可用于三维作图，选中 Matrix 窗口，例如使用 Plot → Image → Image Plot 命令，将数据进行作图，也可以作其他三维图。

如果显示效果不佳，是因为 Origin 打开了 Speed Mode 速度模式，为了得到更精确的图像，可以单击 Graph → Speed Mode 关闭速度模式。

	1	2	3	4	5
1	51657	52171	52428	52685	52942
2	51914	51914	52942	53456	53199
3	51657	51914	52428	52171	52685
4	52685	51914	52428	51914	52685
5	52685	52685	52171	53199	52428
6	52685	52685	52685	52942	52685
7	52685	52428	52428	52428	52685
8	52171	51914	52428	52171	52685
9	52171	52428	53456	53199	52428
10	51400	52428	53199	52685	52685
11	52171	52428	52942	52685	52942
12	52685	53199	52171	52685	52942
13	52428	52685	52428	52428	52942
14	52428	52685	52685	52685	52685
15	52171	52428	52171	52428	52171

图 12.6 图像转换为矩阵数据

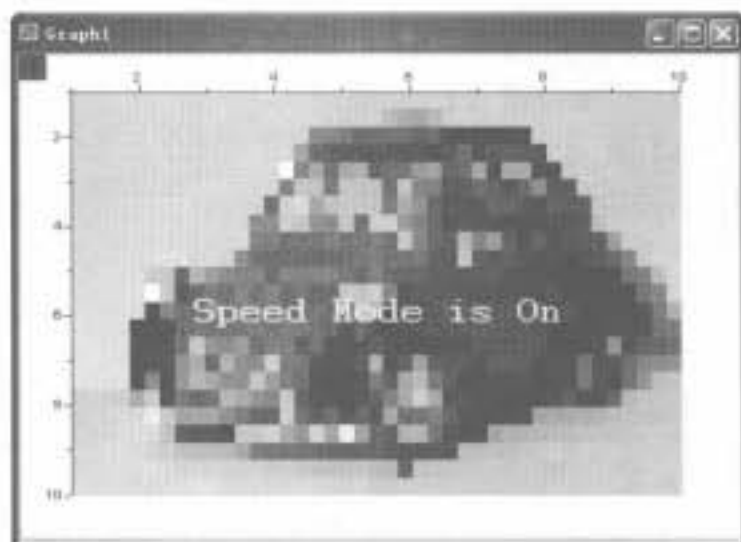


图 12.7 根据数据作三维图形



图 12.8 关闭速度模式

最终得到以下图形（见图 12.9）。

(2) Color to Gray: 将图像从彩色变成黑白。主要参数: Gray Scale (可以设置转换后灰度图像的位数), 如图 12.10 所示。



图 12.9 三维作图结果



图 12.10 转换成灰色图

(3) Convert to Image: 与 Convert to Data 相反, 它可以将 Matrix 数据转换为以图像形式显示。主要参数: Bits/Pixel (可以设置转换后图像的位数)、Black Value (暗调)、White Value (高光), 结果如图 12.11 所示。

(4) Auto Binary: 自动二值图像, 如图 12.12 所示。



图 12.11 直接将矩阵数据转换为图形



图 12.12 自动二值图像处理

(5) Binary: 将 RGB 图像转换为二值图像, 如图 12.13 所示。

主要参数: Low/High (设置要修改的色彩范围)、Channel (色彩通道)。

(6) Dynamic Binary: 动态二值图像, 如图 12.14 所示。

主要参数: Dimension (设置精度)、threshold (设置对比度极限)。

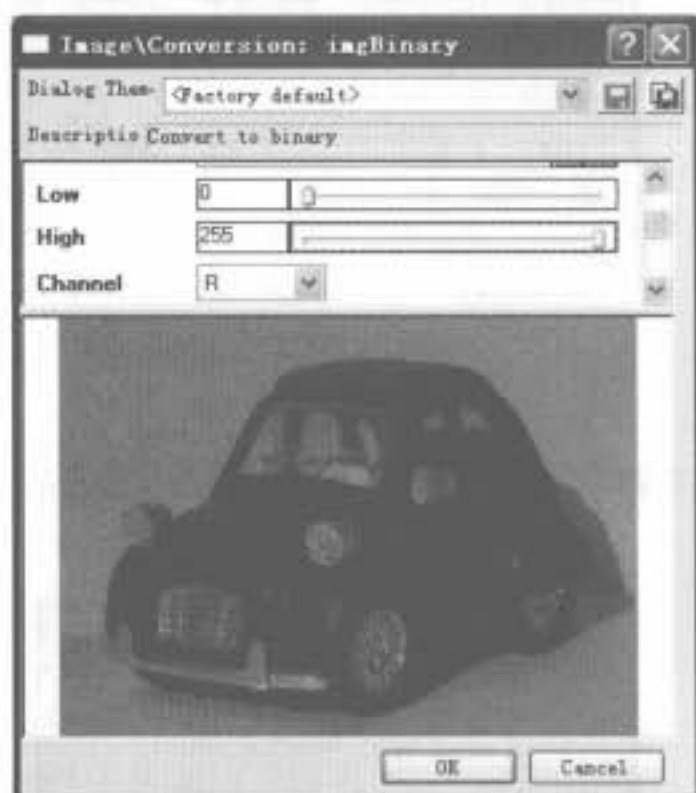


图 12.13 转换成二值图像



图 12.14 动态二值图像

(7) Threshold: 门槛。

主要参数: Lower/High Bound (设置保留的色彩范围)、Channel (色彩通道)、Reject Value (设置要丢弃的色彩的取值方式), 如图 12.15 所示。。

(8) RGB Merge: 可以将多个图像的 R、G、B 通道合并到一个图像上面, 如图 12.16 所示。



图 12.15 门槛过滤

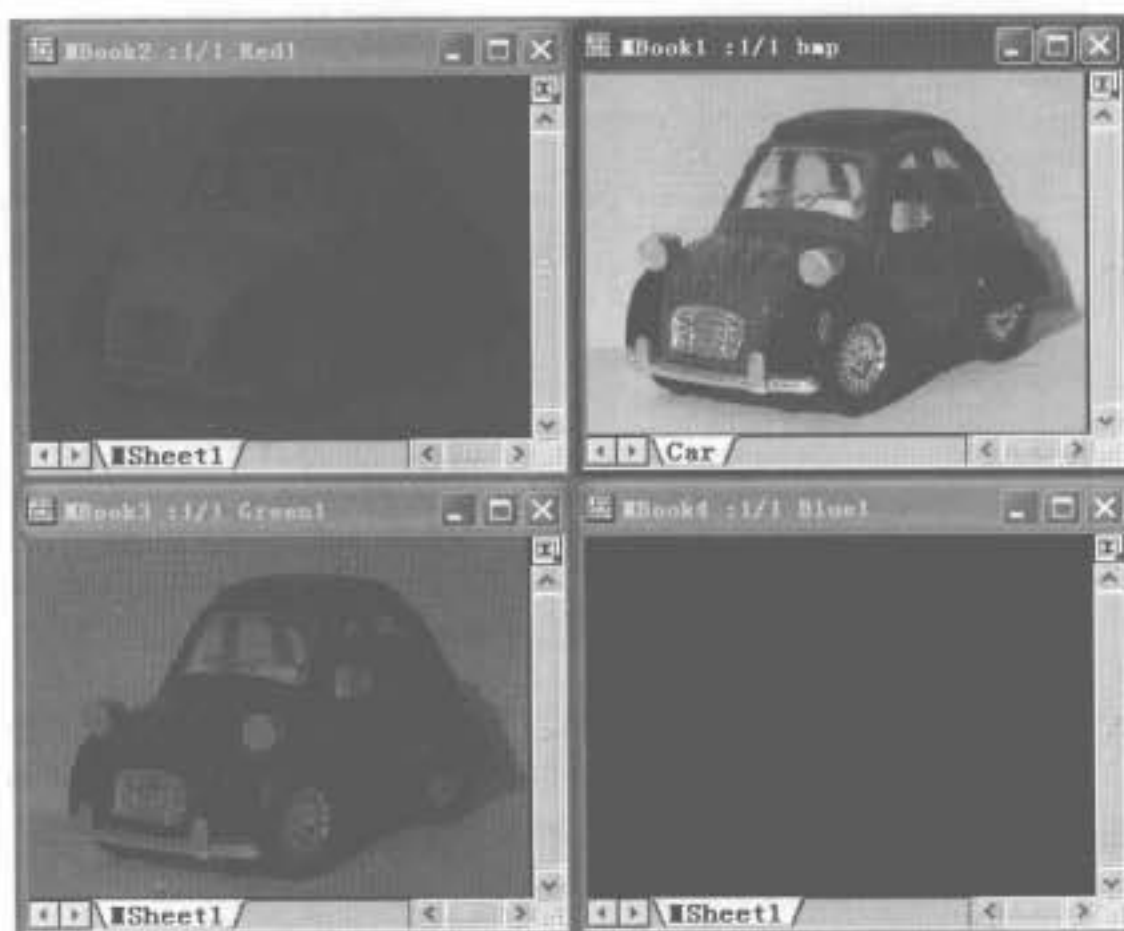


图 12.16 多通道合并

(9) RGB Split: 跟 RGB Merge 相反, 可以将图像的 R、G、B 通道分别输出为图像, 如图 12.17 所示。

主要参数: Colorize (是否输出彩色图像)。

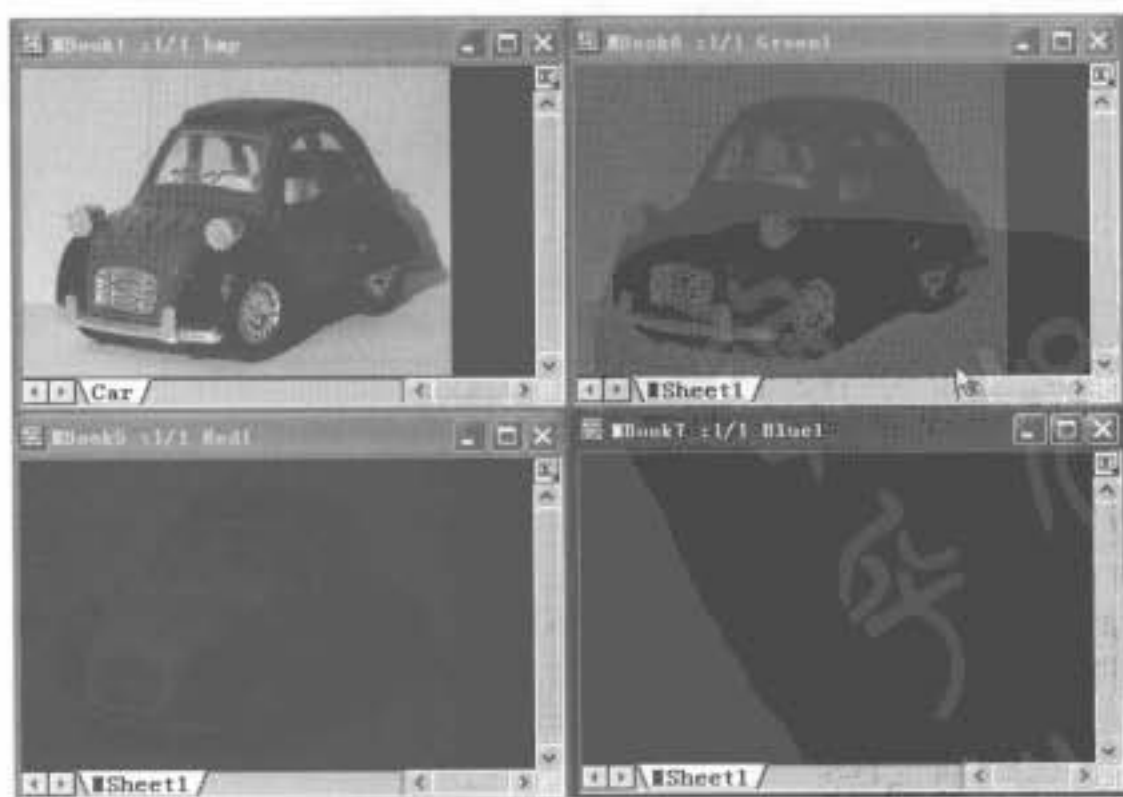


图 12.17 分离色彩通道

(10) Image Scale: 调整图像或画布大小, 如图 12.18 所示。

主要参数: Available In [设置图像的大小 Full Image (全图) 还是 Rectangle (自定义)], New Coordinates (设置画布的大小)。



图 12.18 调整大小

(11) Image Palette: 可以输出图像的调色板, 但色彩数量必须在 25 个以内。主要适用于索引图像文件, 例如 GIF 格式文件。另一种典型的情况是先将图像使用 Color to Gray 命令转换成 8 位灰色图, 这样就可以保证图像色彩数合适, 如图 12.19 所示。



图 12.19 输出调色板

12.5 几何变换

要对图像进行几何变换, 只要选中目标图像所在的 Matrix, 然后执行 Image → Geometric Transform 子菜单下的命令设置参数后, 单击 OK 按钮即可, 如图 12.20 所示。

可供图像几何变换使用的命令包括如下几项。

- (1) Horizontal: 水平翻转;
- (2) Vertical: 垂直翻转;
- (3) Rotate: 按一定角度旋转, 主要用于修正倾斜图像;
- (4) Shear: 裁切图像;
- (5) Resize: 设置图像大小;

(6) AutoTrim: 修整图像, 根据图像四个边角的像素点自动剪切图像。

(7) Offset: 设置图像位置的偏移量。

以上命令的参数设置都比较简单, 这里就不作详细介绍了。



图 12.20 几何变换

12.6 算术变换

要对图像进行算术变换操作, 只要选中目标图像所在的 Matrix 窗口, 然后执行 Image → Arithmetic Transform 子菜单下的命令设置参数后, 单击 OK 按钮即可。

可供图像算术变换使用的命令包括如下几项。

(1) Alpha Blend: 以透明图像叠加到原有的图像上。主要参数: Image to Blend (要叠加的图片)、Opacity (不透明度)、Offset X/Offset Y (偏移量)、Crop to Common Area (是否裁切输出的图像到公共部分的大小), 如图 12.21 所示。

(2) Simple Math: 对输入的图像进行普通的数学运算。主要参数: Input Image (输入的图像)、Channel of Image (要进行数学运算的色彩通道)、Factor *Image (图像在计算中的权重因子)、Offset Z of Image (权重因子偏移量)、Math Function (数学函数)、Offset X/Offset Y (位置偏移量)、Crop to Common Area (是否裁切输出的图像到公共部分的大小)。

(3) Math Function: 对图像进行数学运算。主要参数: Function (运算方式)、Factor (权重因子), 如图 12.22 和图 12.23 所示。



图 12.21 透明图像叠加



图 12.22 数学运算

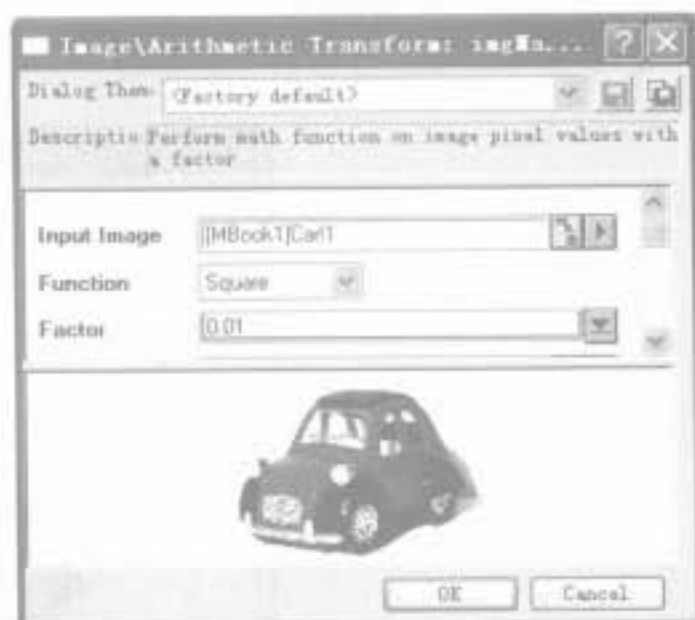


图 12.23 数学函数运算

(4) Pixel Logic: 对图像进行逻辑运算。主要参数: Factor (权重因子)、Logic (运算方式)、Channel (要进行运算的色彩通道), 如图 12.24 所示。

(5) Subtract Background: 可以对图像消去背景。主要参数: Rolling Ball (边缘半径)、Shrink Size (寻找图形位置的方法)、Brightness (设置亮度)、Background (选择背景色彩亮度跟前景的关系)、Show (设置输出图形还是背景), 如图 12.25 所示。



图 12.24 逻辑运算



图 12.25 消除背景

(6) Extra to XYZ: 将图像以 3D 数据方式输出。主要参数: Anchor Shape (要输出的数据范围)、Keep Preview (是否一直显示预览), 如图 12.26 所示。

(7) Morphological Filter: 形态学过滤, 处理灰度图像或二值图像。

(8) Replace Background: 用于替换背景颜色。主要参数: Low Threshold to Replace/High

Threshold to Replace (替换颜色的范围)、Fuzziness (背景色填充数量)、Adjust Brightness (背景亮度)、Background (选择背景色彩亮度跟前景的关系), 如图 12.27 和图 12.28 所示。



图 12.26 提取 3D 数据

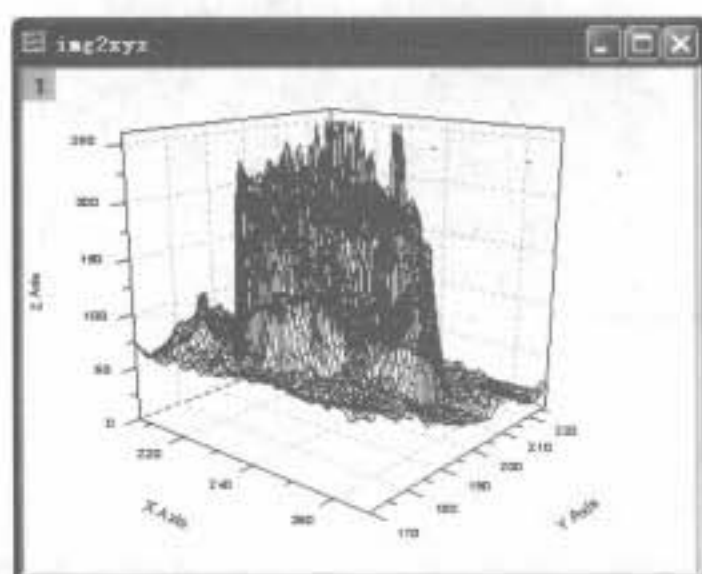


图 12.27 数据作图



图 12.28 替换背景

(9) Subtract Interpolated Background: 以插值方法消除背景(不支持彩色图像), 如图 12.29 和图 12.30 所示。

主要参数: Anchor Num (设置用于插值计算的锚点数量)、Background (选择背景色彩亮度跟前景的关系)、Anchor Shape (锚点形状)、Apply Auto Level (是否自动添加色阶)、Adjust Brightness (调节亮度)。



图 12.29 消除背景



图 12.30 消除后结果

12.7 空间滤镜

要对图像进行转换空间滤镜操作，只要选中目标 Matrix，然后执行 Image → Spatial Filter 子菜单下的命令设置参数后，单击 OK 按钮即可。

可供图像进行空间滤波操作的命令包括如下几项。

- (1) Average: 平均模糊操作。主要参数: Dimension (模糊粒度大小)，如图 12.31 所示。
- (2) Gaussian: 高斯模糊操作。主要参数: Radius (模糊半径)，如图 12.32 所示。



图 12.31 平均模糊



图 12.32 高斯模糊

- (3) Median: 中间值模糊操作。主要参数: Dimension (模糊粒度大小)，如图 12.33 所示。
- (4) Noise: 加入随机的噪音粒子。主要参数: Coverage (覆盖率)，如图 12.34 所示。



图 12.33 中值模糊



图 12.34 加噪

- (5) Edge: 寻找边缘。主要参数: Threshold (边缘检测的范围)，如图 12.35 所示。
- (6) Sharpen: 锐化边缘。主要参数: Sharpness (锐化程度)，如图 12.36 所示。
- (7) Unsharp Mask: 虚光蒙版。主要参数: Adjust (操作范围)、Neighborhood (边缘半径)、Threshold (平滑程度)、Color (色彩模式)，如图 12.37 所示。



图 12.35 寻找边缘



图 12.36 锐化边缘



图 12.37 虚光蒙版

(8) User Filter: 可以导入自定义的滤镜算法。主要参数: Filter Matrix (输入的滤镜 Matrix)、Offset (偏移量)、Divisor (过滤的程度大小)、Operation Type (操作模式)。

12.8 图像输出

要输出图像, 可以先通过 Plot → Image → Image Plot 将 Matrix 转成 Graph 格式, 再通过剪贴板或 File → Export 命令输出, 也可以直接通过 File → Export 命令输出。主要支持的格式见表 12.1。

表 12.1 图像常用输出格式

图像类型	扩展名
Bitmap	*.bmp
Graphics Interchange Format	*.gif
Joint Photographic Experts Group	*.jpg
Zsoft PC Paintbrush Bitmap	*.pcx
Portable Network Graphics	*.png
Truevision Targa	*.tga
Adobe Photoshop	*.psd
Tag Image File	*.tif

对于位图, 输出时可以根据需要选择或设定分辨率大小。

Part 4

第四篇

技术扩展

本篇内容

■ 第13章 编程与自动化

新
年
賀
歲

本章要点

- LabTalk 脚本
- Origin C 语言
- X-Functions 框架
- 精选功能扩展

Origin 软件提供了数据表、科技作图和数学分析的框架和丰富的功能，然而在现实应用中也有可能需要使用到 Origin 没有提供的功能，如何实现这一点呢？方法就是使用编程和定制。

幸运的是，Origin 软件一开始就被设计成一种开放式的框架，8.0 版本进一步深化了这方面的工作，它不但允许你进行个性化的定制，例如使用 Import Filter（导入过滤器）定制导入参数、使用 Templates（模板）定制各种子窗口、使用 Themes（主题）定制对象格式，而且提供了两套编程环境，包括 LabTalk 脚本和 Origin C 编程语言，其中 LabTalk 脚本比较简单，Origin C 功能比较强大，LabTalk 擅长于 Origin 的内置操作，Origin C 擅长于逻辑处理。此外，8.0 版提供的 X-Functions 新框架进一步简化了功能的调用调试和参数设置过程。

利用这些编程功能和框架，可以方便地为 Origin 软件增加和定制数据的导入、作图、分析和导出等功能，通过在 Origin 软件内部或者外部调用可实现大量数据的批处理和软件自动化。所有这些功能也可以进行编译和网络共享，这样对于不希望自己进行编程和设计算法的用户，只要简单的学习如何使用这些环境然后下载相应的程序扩展，再按要求进行操作即可。

13.1 LabTalk 脚本语言

LabTalk 是一种脚本语言（Scripting Language），它通过命令行批处理的方式实现软件提供的功能或者进行简单的编程和计算，利用 LabTalk 可以帮我们完成一些很烦琐但有规律的工作。

13.1.1 Command Window

通过 Window → Command Window 命令可以打开 Command Window 进行 LabTalk 程序的编写。只要在右边窗口中写上合法的语句，按下 Enter 键便会执行程序，并在左边的窗口记

录下执行过的程序。

另外,通过 Window → Script Window 命令可以打开旧版本的命令窗口,叫做 Classic Script Window,其作用跟 Command Window 大同小异,但功能略有差异,如图 13.1 和图 13.2 所示。



图 13.1 命令窗口

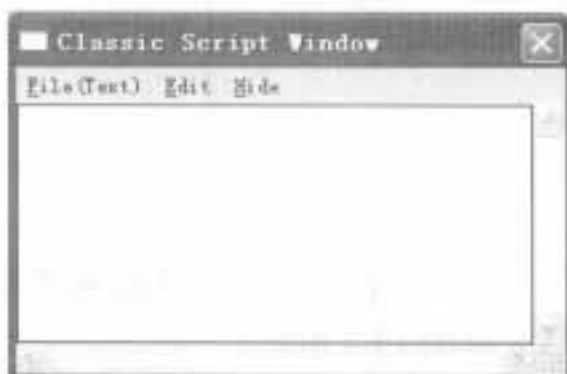


图 13.2 脚本窗口

13.1.2 执行命令

要执行命令,只要在 Command Window 里右边的窗口输入代码,然后按下 Enter 键,即可执行代码。结果马上会在代码下面出现,而且会在左边的窗口记录下曾经执行的代码(历史功能),如图 13.3 所示。

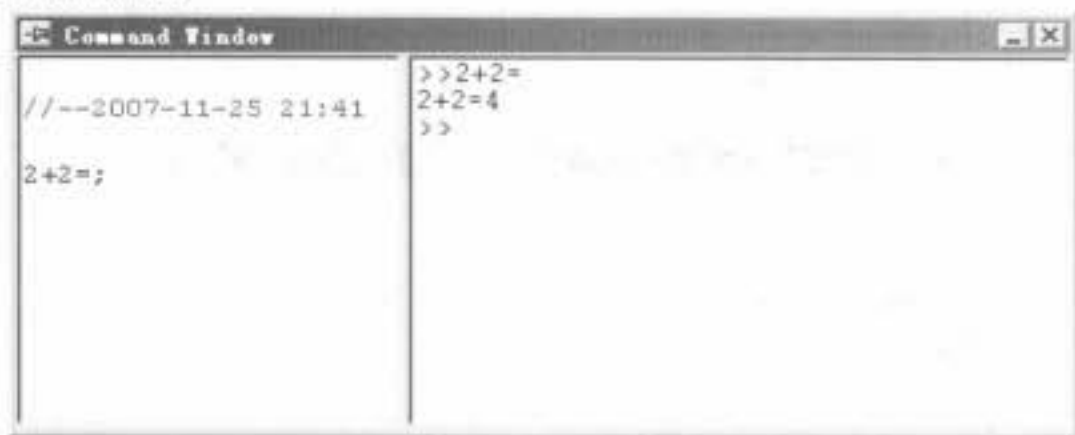


图 13.3 直接运算

每执行一行代码,变量的值都会被 Origin 记录起来,所以,可以一行一行地输入要执行的代码,以便完成多行代码的执行,如图 13.4 所示。

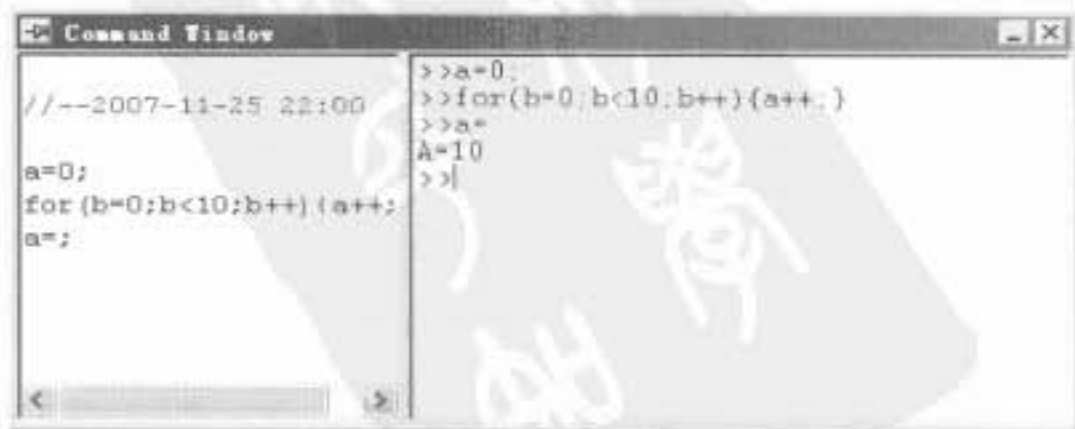


图 13.4 多行命令

在 Command Window 里,写的代码一般不宜太长,并且要注意符合语法规则,因为在这个窗口里,代码是即时检验的,一旦发生语法错误,会马上因为报错而终止,如图 13.5 所示。



图 13.5 语法检查

也可以在其他文本编辑器里面先写好代码，再贴到 Command Window 上面执行，如图 13.6 和图 13.7 所示。



图 13.6 用记事本编辑批命令



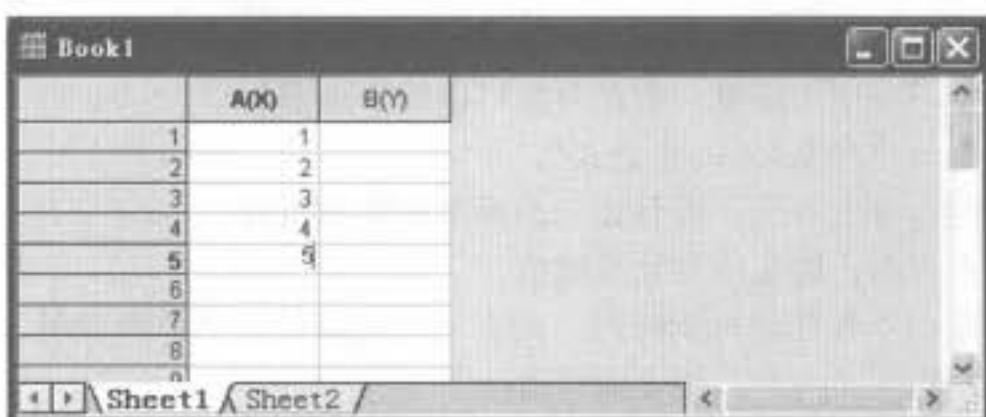
图 13.7 粘贴到命令窗口中执行

除了使用基本语句之外，你还可以在语句中使用函数，如图 13.8 所示。



图 13.8 使用函数

除了在 Command Window 里进行运算外，也可以从 Worksheet 里面读取数据，或者输出结果到 Worksheet 里面。不存在的 Workbook 或者 Worksheet 等对象会根据需要自动创建，如图 13.9~图 13.11 所示。

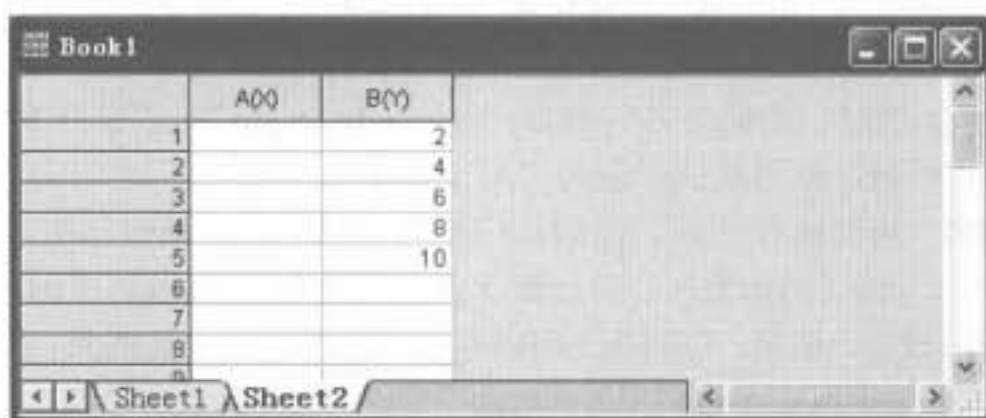


	A(X)	B(Y)
1	1	1
2	2	2
3	3	3
4	4	4
5	5	5
6		
7		
8		

图 13.9 源数据表格



图 13.10 使用数据表中的内容进行运算



	A(X)	B(Y)
1		2
2		4
3		6
4		8
5		10
6		
7		
8		

图 13.11 输出结果到数据表中

13.1.3 LabTalk 语法

1. 变量和对象

(1) LabTalk 主要支持整型、双精度、字符串、字符串数据组、范围、二叉树、数列等变量类型。如 `A = 52` ; `strTemp$ = "hello world"`; `b=[Book1]Sheet1!Col(B)` 等。

(2) 现代编程语言广泛以对象 (Object) 作为基本概念, 一个对象 (Object) 拥有与之相关的属性 (Properties) 用于读写和一系列的方法 (Methods)。

(3) 要对 Origin 进行编程, 除了抽象意义上的对象概念外, 主要是要操作各种 Origin 对象 (Origin Objects), 包括工作簿对象、图形窗口对象、层、表、数据集等。如以下代码完成了多种操作 (//后面的为说明):

```

plotxy (1,2) graph:=<new show:=0>; // 使用 A 列(x)和 B 列(y)生成一个隐藏的图形
range aa=plotxy.graph$;
int uid=aa.GetPage();
string str$=uid2Name(uid)$;
type "Result graph name is %(str$)"; // 输出图形名称
  
```

2. 赋值

(1) 字符串对象不能用于运算，数据对象可以用于运算。

(2) 基本格式为：“对象名 = 表达式”。

(3) 对象名只能以英文开头，而且完全由英文和数字组成。

(4) 如果对象不存在，则生成对象并赋值。

(5) 当对象名前面不带任何标识符时，则表示该对象是一个数据变量，并把表达式的值赋予该变量。例如：输入“a=7”，则a的值为7。

(6) 当对象名有一个%带一个大写的A~Z时，表达式为一个字符串时，则表示该对象是一个字符串变量，并把表达式的值赋予该变量。例如：输入“%A=Origin”，则%A的值为字符串Origin。

(7) 如果对象名有一个%带一个大写的A~Z时，而表达式是一个数据集名，则表示该对象是一个数据集，并把表达式的值赋予该对象。

(8) “\$(数据)”可以把数据转换成字符串。例如：输入“%A=\$(65)”，则%A的值为字符串65。

(9) “#”或“//”后可以添加注释，注释不会被执行。例如：输入“a=7;//b=8”，则a的值为7，“b=8”没有执行，b仍然未被赋值。

3. 操作数据集

(1) 创建数据集格式为：“create 数据集名 数据集大小”。例如：输入“create origin 10”，则可以创建一个名为“origin”的Worksheet。

(2) 编辑数据集为：“edit 数据集名”。例如：输入“edit origin”可以打开Worksheet“origin”，你会发现它有X、Y两列，X列默认标题为“A”，行数为17。

(3) “表名_列名”为要操作的列。比如origin_A是指origin数据集中名为A的列。

(4) “数据集名 = data (初始数字, 结尾数字, 间隔数字)”可以直接创建数据集并以“初始数字”开始，“结尾数字”结尾，每间隔“间隔数字”把数字填入数据集。例如：输入“origin = data (1, 100, 3)”，则可以在Worksheet“origin”的Y轴从1至34行以1, 4, 7, 10, 13...的顺序填入数据。

(5) 要填入确定值的数据，可以用：“数据集名={表达式1, 表达式2, ...}”。

(6) 要给特定数据赋值，可以用：“数据集名[下标]=表达式”。例如：输入“origin1[3]=100”，则可以在Y轴的第3行填入数据100。

(7) 用“col(列号)=表达式”可以给列赋值。“col(列号)[行号]=表达式”可以给表中特定元素赋值。例如：输入“col(2)=50”，则可以在Y轴所有单元格填入数据50。

(8) 如果表中包含文本，则要用“col(列号)[行号]\$=表达式”来赋值。

(9) 可以用“变量=表名_列名(表达式)”来搜索表达式在数据集中的位置。例如：输入“origin_A(10)=”，则输出“origin_A(10)=28”。

(10) 需要注意的是，要使用已有的数据集，不能只写“edit 数据集名”，要先用“create 数据集名”做一个同名的数据集。

(11) “%(数据集名, 列号, 行号)”可以返回特定单元格的值。

(12) “%(列号, @L)”可以返回列名。例如：输入“%(1, @L)=”，则输出“A=--”。

(13) “%(数据集名, @选项, 列号)”可以返回更多关于列的信息。

选项为#时返回数据集的列总数；

选项为 C 时返回该列名；
 选项为 D 时返回该数据集名；
 选项为 T 时返回该列数据类型；
 更多的信息请参考 Origin 的编程帮助文档。

4. 数据运算

基本的数据操作见表 13.1。

表 13.1 数据操作符简表

符 号	作 用	表达式	等价表达式
+	加法	$x+y$	
-	减法	$x-y$	
*	乘法	$x*y$	
/	除法	x/y	
^	乘幂	x^y	
&	按位与（二进制）	$x\&y$	
	按位或（二进制）	$x y$	
=	赋值	$x=y$	
+=	将 x 赋值为 x 加 y	$x+=y$	$x=x+y$
-=	将 x 赋值为 x 减 y	$x-=y$	$x=x-y$
=	将 x 赋值为 x 乘以 y	$x=y$	$x=x*y$
/=	将 x 赋值为 x 除以 y	$x/=y$	$x=x/y$
^=	将 x 赋值为 x 的 y 次方	$x^-=y$	$x=x^y$
++	将 x 增加 1	$x++$	$x=x+1$
--	将 x 减少 1	$x--$	$x=x-1$
>	判断 x 是否大于 y	$x>y$	
<	判断 x 是否小于 y	$x<y$	
>=	判断 x 是否大于或等于 y	$x>=y$	
<=	判断 x 是否小于或等于 y	$x<=y$	
==	判断 x 是否等于 y	$x==y$	
!=	判断 x 是否不等于 y	$x!=y$	
&&	判断是否 x 与 y 均为 true	$x\&\&y$	
	判断是否 x 或 y 为 true	$x y$	
?:	x 为 true 时返回 y x 为 false 时返回 z	$x?y:z$	

此外，还可以用函数来操作数据。这些函数中包括有 $\sin()$ 、 $\cos()$ 等各种复杂一些的数据操作方法，具体可以参考 Origin 的编程帮助文档。另外，在编辑 Matrix 时选择 Matrix → Set Values 命令，其中选择函数的下拉表格中也有列出这些函数及其用法，基本上可以直接在 Script Window 中使用。表 13.2 列出一些常用的数学函数。

表 13.2 常用数学函数表

函 数	作用与返回值
$\text{prec}(x, p)$	返回 x 的 p 位有效数字的科学记数法表示的形式
$\text{round}(x, p)$	返回 x 的 p 位有效数字的四舍五入的数字

续表

函 数	作用与返回值
abs(x)	返回 x 的绝对值
angle(x, y)	返回 x,y 的以弧度表示的角度
exp(x)	返回以自然对数 E 为底数, x 为指数的表达式的值
sqrt(x)	返回 x 的开平方根
ln(x)	返回以自然对数 E 为底数的 x 的指数
log(x)	返回以 10 为底数的 x 的指数
int(x)	返回 x 的 Integer 值
nint(x)	相当于 round(x, 0)
sin(x)	返回 x 的正弦值
cos(x)	返回 x 的余弦值
tan(x)	返回 x 的正切值
asin(x)	返回 x 的反正弦值
acos(x)	返回 x 的反余弦值
atan(x)	返回 x 的反正切值

5. 流程控制

(1) 程序的执行。

“程序段 1;程序段 2;...程序段 N”，即是说，程序段之间用分号隔开，直到程序段后不带分号，按下 Enter 键时，程序就会执行（记住写完整之前不要换行）。例如：输入“a=7;a=b;b=8;//b=”，则输出“A=7”。

(2) 宏语句。

“define 宏名[内容]”，创建宏以后可以直接用它的名字来代替执行宏的内容，而且宏比一般程序段的优先级高。例如：输入“define mar{b=7};b=;mar;b=;”，输出“B=--- B=7”。

(3) 命令语句。

“命令 [-选项] [参数]”。下面列出一些常用命令基本作用，如要了解其详细操作，请参考 Origin 的编程帮助文档，见表 13.3。

表 13.3 常用命令列表

命令格式	基本作用
average [选项] 数据集 [范围]	对数据集求平均值
axis [选项] [xyz 轴格式]	设置 xyz 轴的格式
break [选项] 参数	跳出循环
clipboard 窗口名字	把剪贴板的内容复制到特定窗口
continue	跳出当前循环，转入下一循环
copy [选项] 数据集 1 数据集 2 [数据集 3]	复制数据集
create 对象名 [选项] [行数]	创建对象
dde [选项] 参数	与其他程序建立链接
define 宏名 [宏内容]	定义宏
delete [选项] <对象名>	删除对象
derivative [选项] 数据集 [范围]	取子集
dll [选项] dll 名 <dll 函数名 dll 字段>	操作 dll 文件
document 选项 参数	操作文档

续表

命令格式	基本作用
dotoolbox [选项] < 工具号码 [信息 1 信息 2 ...]>	操作工具条的工具
draw	画屏幕
edit [选项] <数据集名>	编辑数据集
exit	退出 Origin
file 选项 路径\文件名 1 路径\文件名 2	操作硬盘上的文件
for (表达式 1; 表达式 2; 表达式 3) {循环内容}	循环操作。表达式 1 为初始化条件; 表达式 2 为进行循环的条件; 表达式 3 也表示循环的内容。表达式的程序段要用, 来隔开。四个参数均可写可不写
get 对象 选项 [属性]	读取对象的属性
getfilename [选项] 参数	打开文件
getnumber [选项] (变量描述 1) 变量 1 (变量描述 2) 变量 2 [对话框标题]	输入数据
getpts [选项] 点数 [(信息)]	取得数据点信息
getsavename [文件名] *.后缀名	保存文件
getstring (信息) 初始值 [(对话框标题)]	输入字符串
getyesno (信息) 变量 [(对话框标题)]	打开是/否对话框
if (表达式) {内容 1} [else {内容 2}]	如果表达式为 true 则执行内容 1, 否则则执行内容 2
integrate [-r 源数据集] 数据集 [范围]	对数据集积分
label [选项] 信息	添加标签
layer [选项] <宽 高 x 坐标偏移量 y 坐标偏移量>	操作层
legend	创建或更新图形
limit [选项] 数据集 [范围]	给数据集划定范围
list 参数	显示数据集
loop (变量, 开始, 结束) {内容}	循环操作
mark 选项 数据集 [范围]	为数据集作记号
math [选项] 数据集 1 数据集 2	算术操作
matrix 选项 参数	操作 Matrix
menu [选项] <参数列表 [(内容)]>	操作菜单
open 选项 文件名	打开或导入文件
page [选项]	选择页面
plot [选项] 数据集	操作数据图
print [选项]	打印项
queue {内容}	窗口重载时执行内容
repeat 次数 {内容}	执行内容一定次数
return [值]	返回值后跳出宏或程序段
run [选项] 参数	运行程序
save [选项]	保存文件
second [选项] [参数]	时间与程序运行的关联操作
select [选项] 值	选择对象的操作
set 对象名 [选项] [值]	设置对象属性
sort [选项] 对象 1 [对象 2 对象 3 ...]	排列对象
switch (表达式) {case 1:内容 1 case 2:内容 2 case n:内容 3 [default:内容 4]}	由表达式的值决定执行内容

续表

命令格式	基本作用
timer <循环次数>	运行宏次数
type [选项] 字符串	输出字符串
undo [选项] [数据集]	取消操作
window 选项	窗口操作
Worksheet 选项 参数	worksheet 操作

(4) 参数传递: “run.session (对象, 参数 1 [参数 2 参数 3...])” 可以把参数传到宏或程序段, 之后可以用 %1, %2, %3... 来获得参数。

例如: 在 origin.ogs 文件中, 存在:

```
[var]
type "%1 %2 %3";
则执行 run.session(origin.ogs,var,"it" "is" "an origin")时,%1为"it", %2为"is", %3为"an origin".
```

6. 常见错误与调试

编程跟错误与调试是无法分开的, 所以我们应当培养自己的排错能力, 下面对它们做一些简介。

错误:

“#Command Error!” 表示命令格式输入错误。应当检查有没有写错语句。有的时候, 你发现输入程序没有执行, 也不报错, 那很可能是你在程序段后加了分号。要执行的语句最后面不应该带有分号。

调试:

(1) 系统变量 ECHO: 改变 ECHO 的值可以显示不同的信息: 0 为默认全部信息; 1 显示错误的程序; 7 显示执行的程序。

(2) list 指令: list 指令可以显示已有的数据集。

(3) 跟踪变量: “varName=” 可以跟踪变量在运行时的值。当然, 你也可以利用其他输出方式来跟踪变量。

13.2 Origin C 语言

由于脚本语言如 LabTalk 是没有经过编译的, 所以在处理大量程序时, 速度比较慢。而在 Origin 这种软件中, 运算量是比较大的。所以开发者在 Origin 中添加了一种叫做 Origin C 的语言, 它是建立在 C/C++ 的基础上的, Origin C 的编译器是在 ANSI C 的基础上扩充的。

如果你从没接触过编程, 那么要熟练运用 Origin C, 最好应该先学数据结构, 否则运用起来会比较困难。

本节主要介绍 Origin C 的基本语法, 并指出 Origin C 与 C/C++/C# 的不同之处。如要深入理解, 还是应该找一本关于 C 语言的书来学习。

13.2.1 工作环境

选择 View → Code Builder 命令可以打开 Origin C 的编辑窗口, 如图 13.12 所示。

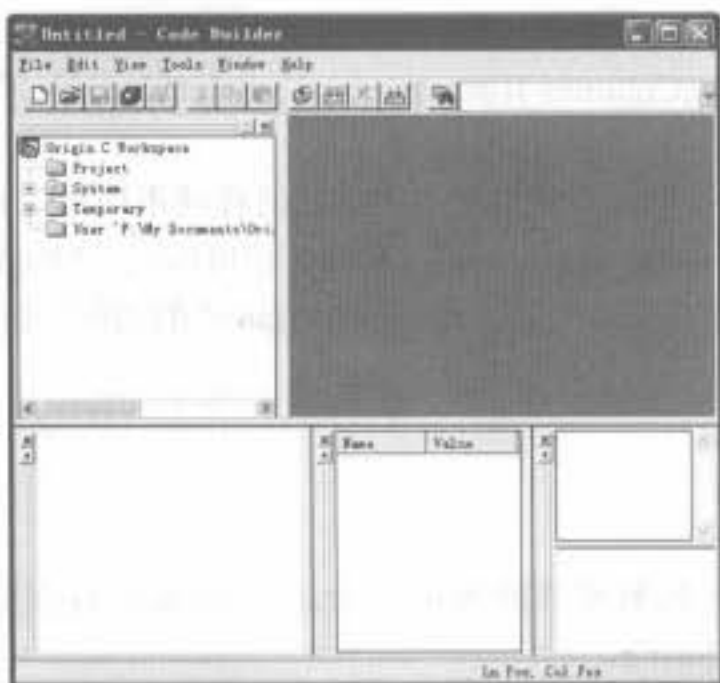





图 13.12 Code Builder 窗口

基本上你可以把它看作一个文本编辑器在文件目录树中可以选择打开程序；在右边是一个文本编辑框，程序基本上都写在这里；右下是 LabTalk 窗口，可以用来测试写好的程序；左下的窗口是用来显示编译器运行情况；此外  按钮可以编译当前的程序文件， 按钮可以编译已修改的程序文件， 则是将该所有程序重新编译。

13.2.2 Origin C 与其他语言对比

Origin C 与 C。

- (1) 跟 C 语言一样，Origin C 也不是完全 OOP 架构的语言，它主要由一些基本数据类型，一些全局函数和大量的类组成。
- (2) Origin C 不支持 C 语言的 `main()` 函数。
- (3) Origin C 不支持 2 维以上的数组，要使用 2 维数组，可以利用 Matrix 来代替。例如：“`matrix<int> aa(5, 6);`”可以创建一个 5×6 的 Matrix。
- (4) Origin C 以 “^” 符号代替了 C 语言的取幂算符 “`pow(x,y)`”。

13.2.3 Origin C 与 C++

- (1) Origin C 没有变量声明的限制。
- (2) 与 C++ 一样，Origin C 调用函数也是根据重载函数的参数的不同来决定使用哪一个函数。被重载的函数不能从 LabTalk 调用。
- (3) Origin C 也支持内部类。
- (4) Origin C 也是通过参数来传递变量的。
- (5) Origin C 支持默认参数。当填入的参数数量比函数所需的参数少时，函数将缺失参数的位置的数字作为该位置的参数填入。

13.2.4 Origin C 与 C#

- (1) Origin C 包含 Collection 类。Collection 类是一个十分有用的类，可以用来方便地存放和提取对象。

(2) Origin C 支持 foreach 循环, foreach 循环可以很方便地遍历一个数据集。例如你可以用“foreach(Column x in y.Columns){printf("%s\n", x.GetName());}”来输出 y 数据集中全部列的名字。

(3) using 关键字可以在创建对象时代替类型, 这样就不用指定对象的类型了, 编译器会自动识别对象类型。例如:“using wpg = wks.GetPage();”可以代替“Page wpg = wks.GetPage();”。

(4) 此外, 你还可以通过引入头文件来扩展 Origin C 的功能。格式是:“#include”文件地址及文件名”。

13.2.5 语法基础

1. 常量与变量

(1) Origin C 的常量包括整型常量 byte, short, int, boolean; 浮点型常量 float, double; 字符型常量 char 和字符串常量 String。

(2) 变量是用于储存数值的空间, 它的表示方式是以英文开头的, 且只由英文、数字和下划线“_”组成。

(3) 给变量赋值的格式是:“变量类型 变量名=值”。例如:“float origin = 8.0f;”

2. 运算符

用法基本跟 LabTalk 一样, 除“+,-,*,/,%,&&,||,>,<,>=,<=,==,!=,+=,-=,*=,/=,%=”外, 还有“!”表示逻辑关系的非;“<<=,>>=”表示位移;“&=”表示位逻辑与;“|=”表示位逻辑或;“^=”表示位逻辑异或;“?:”表示条件运算符。

3. 流程控制

(1) if-else 语句。

(2) switch 语句。

(3) for 循环语句。

(4) foreach 循环语句。

(5) break 和 continue 关键字。

(6) while 循环语句: 格式“while(循环条件){内容}”, 当循环条件为 true 时, 执行内容直到循环条件不为 true。

(7) do-while 循环语句: 格式“do{内容}while(循环条件)”, 与 while 循环语句作用基本一样, 不同之处是 do-while 循环会执行至少一次。

(8) goto 语句: 你可以先创建一个标签, 格式是在变量名后面跟一个冒号如:“myLabel:”。之后, 使用 goto 语句如:“goto myLabel;”可以跳到这个标签上。

(9) 输出语句: 利用“printf(对象);”可以输出对象的内容。

(10) 自定义函数: “类型 函数名([参数 1, 参数 2,...])[内容]”, 之后可以用函数名及其参数来调用函数。

4. 使用类库与全局函数

任何对象都可以使用全局函数, 而类函数则只能由类实例来使用。

13.2.6 创建 Origin C 程序

本节将创建一个用 Origin C 打印九九乘法表的程序, 主要让读者了解创建程序的步骤。更深入的开发知识留给读者自己去摸索。

- (1) 选择 View → Code Builder 命令。
- (2) 在 Code Builder 中选择 File → New 命令创建一个新的 C File, 如图 13.13 所示。
- (3) 在右边的文本编辑框中输入以下内容以创建函数 fillNumbers()。



图 13.13 创建 Origin C 程序

- (4) 选择 Tools → Build 命令编译该文件。
- (5) 在 Origin 中选择 Window → Script Window 命令打开用于执行 LabTalk 脚本的 Script Window。
- (6) 在 Script Window 中通过输入函数名 “fillNumbers()” 来使用新建的函数, 结果输出函数的内容 (该函数用于打印一个乘法表的结果), 如图 13.14 所示。

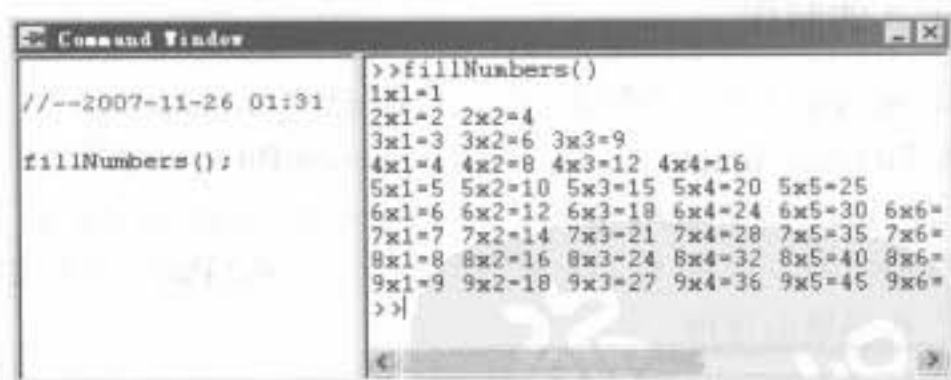


图 13.14 创建 Origin C 程序-运行结果

13.3 X-Functions

在 Origin8 的编程系统里面, 新增了一个称为 X-Functions 的框架。事实上, 每一个 X-Function 就是一个已编译好的 Origin C 程序。利用这些现成的 X-Function, 你可以方便地对 Origin 进行操作, 还可以写一些小程序来对数据进行批处理等操作, 大大地节约了时间。

13.3.1 X-Function 的使用

X-Function 的调用, 除了一部分附在菜单命令上, 可以直接单击使用之外, 主要是在 Command Window 通过程序中的语句来调用。其中的参数以参数名后跟 “:” 来表示, 参数值用 “=” 号赋予参数。如 average 函数, 其中 iy 参数表示输入数据的范围, 使用时按照:

```
average iy:=(Col(1),Col(2)) method:=2
```

这样的格式使用，如图 13.15 所示。

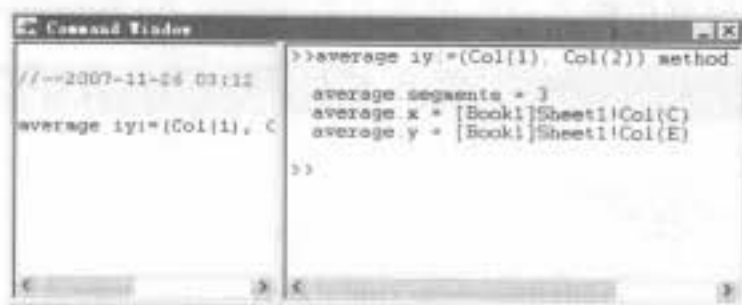


图 13.15 调用 X-Function

另外，在 Command Window 里使用 X-Function 时还有函数提示，方便使用，如图 13.16 所示。



图 13.16 提示功能

具体的 X-Function 的作用，请参考 Origin8 自带的帮助文档《X-Function Reference》，里面很详尽地说明了各个函数的具体作用以及使用方法。

13.3.2 X-Function 的制作

除了现有的 X-Function 之外，我们还可以制作自己的 X-Function。

通过 Tools → X-Function Builder 可以打开 X-Function Builder 对话框。

首先单击 New X-Function Wizard 按钮，打开 New X-Function Wizard 对话框。设置好输入和输出参数的个数和类型，如图 13.17~图 13.21 所示。然后编写各个参数之间的联系，参数的符号可以直接在代码里面使用。

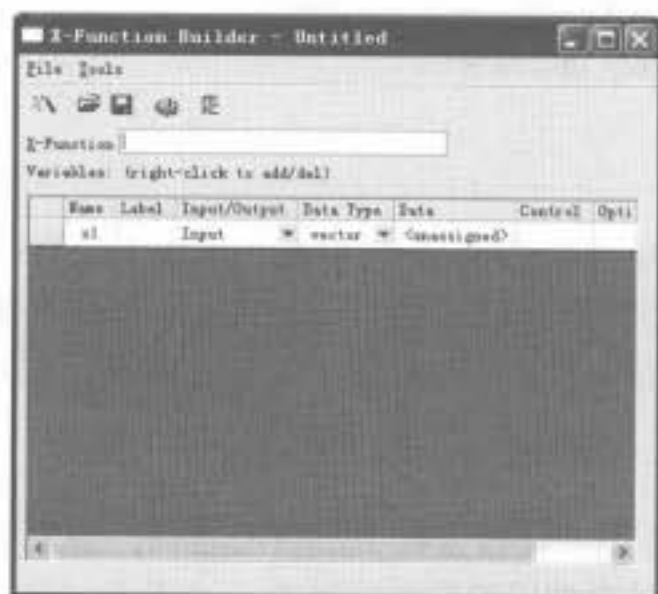


图 13.17 建立 X-Functions 向导



图 13.18 建立 X-Functions 向导：输入变量个数

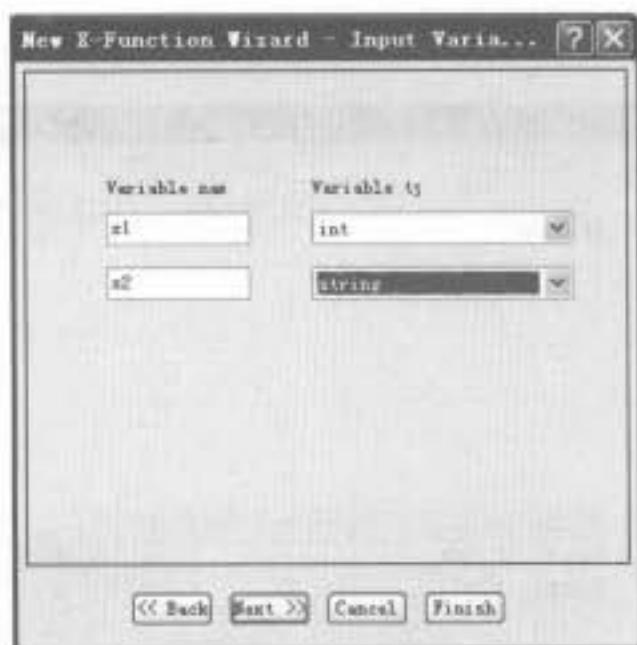


图 13.19 建立 X-Functions 向导：变量数据类型



图 13.20 建立 X-Functions 向导：输出变量个数



图 13.21 建立 X-Functions 向导：输出变量类型

设置好各参数的默认值，单击 Finish 按钮，如图 13.22 和图 13.23 所示。



图 13.22 建立 X-Functions 向导：程序主体



图 13.23 建立 X-Functions 向导：默认变量

之后填入函数名称，保存函数即完成 X-Function 的编辑，如图 13.24 和图 13.25 所示。

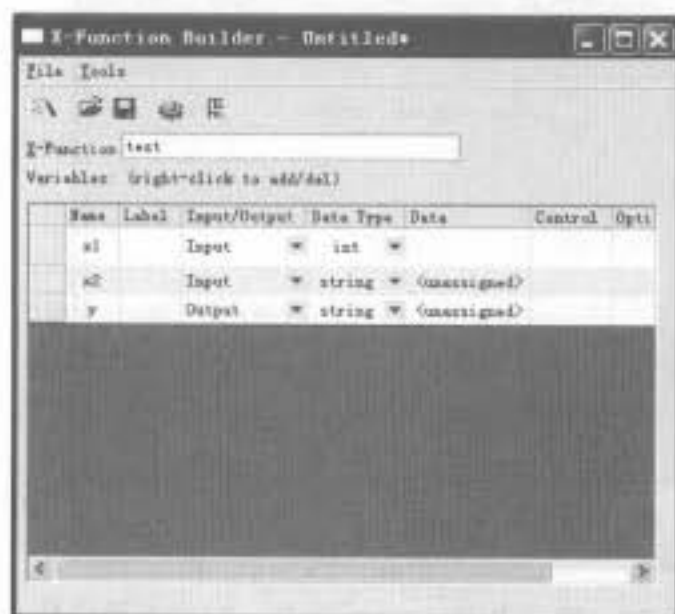


图 13.24 建立 X-Functions 向导：完成



图 13.25 保存 X-Function

现在我们来测试所制作的 X-Function。在 Command Window 里面写上函数以及参数，运行，结果正如我们所料，如图 13.26 所示。

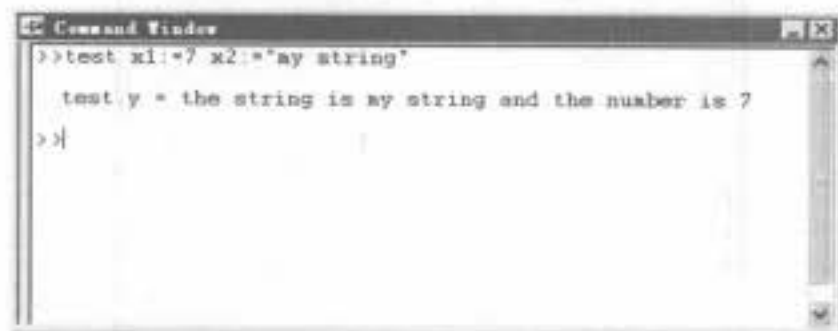


图 13.26 运行自定义 X-Function

通过编写 X-Function，我们可以实现自己想要的功能，并可重复使用，提高了工作效率。

13.4 精选程序扩展和插件

前面已经讨论过，Origin 中有一些功能实现不了，大部分人对编程又觉得吃力，最佳的方法就是下载别人编写过的扩展功能插件了。Origin 官方网站文件交流栏目 (File Exchange, <http://www.originlab.com/fileexchange/index.aspx>)，或 Origin 官方论坛 (The Origin Forum, <http://www.originlab.com/forum/default.asp>) 为我们提供了很好的机会，请读者自行下载安装。

关于扩展功能和插件的安装：如果是压缩文件就首先解压缩，解压缩结果如是.OPK 文件，就直接将文件拖到 Origin 软件上即可，如果是 EXE 可执行文件则按指示进行安装。

下面按分类就一些最常用的扩展和插件进行简单介绍。

(1) Data Acquisition 数据获取。

- 1) Script Commands for RS232: 使用 Origin 与 RS232 接口通信；
- 2) Data Recorder: 实时读取 LabView 数据。

(2) Data Exploration 数据探查。

- 1) Tangents: 通过一点做切线，如图 13.27 和图 13.28 所示。

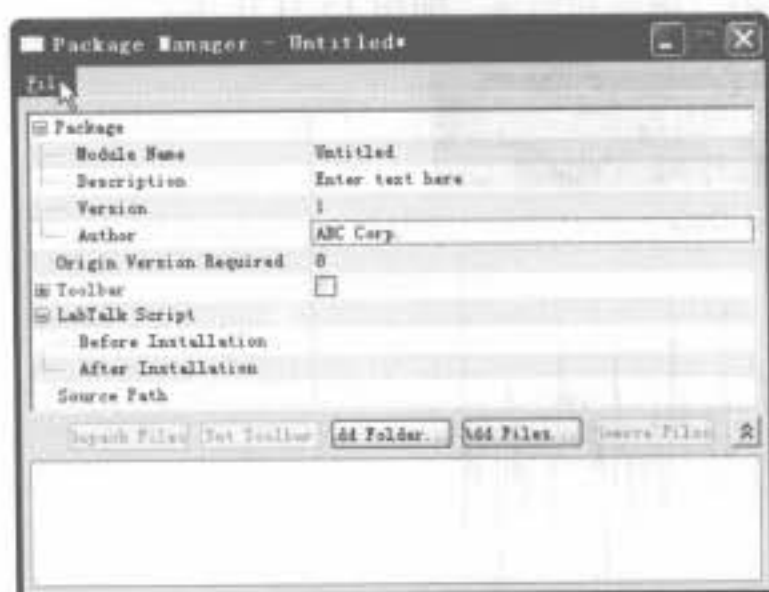


图 13.27 安装或制裁插件

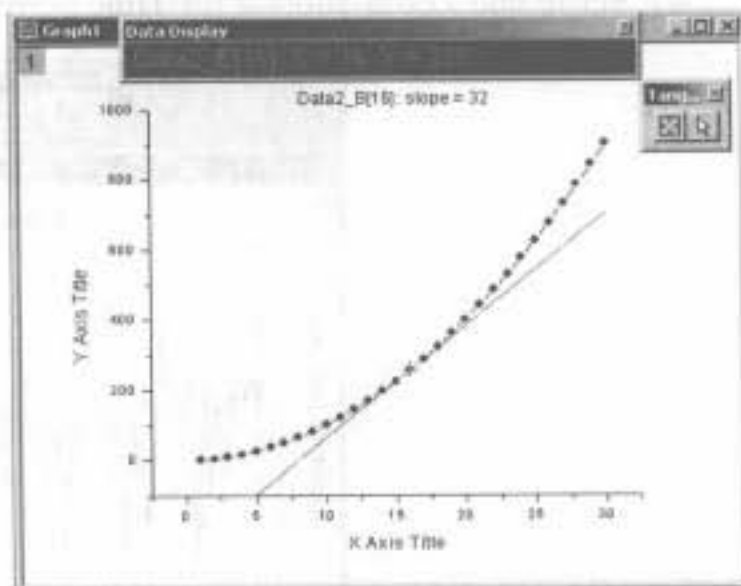


图 13.28 做点的切线

2) Extract data from graph: 从图形中提取数据, 如图 13.29 所示。

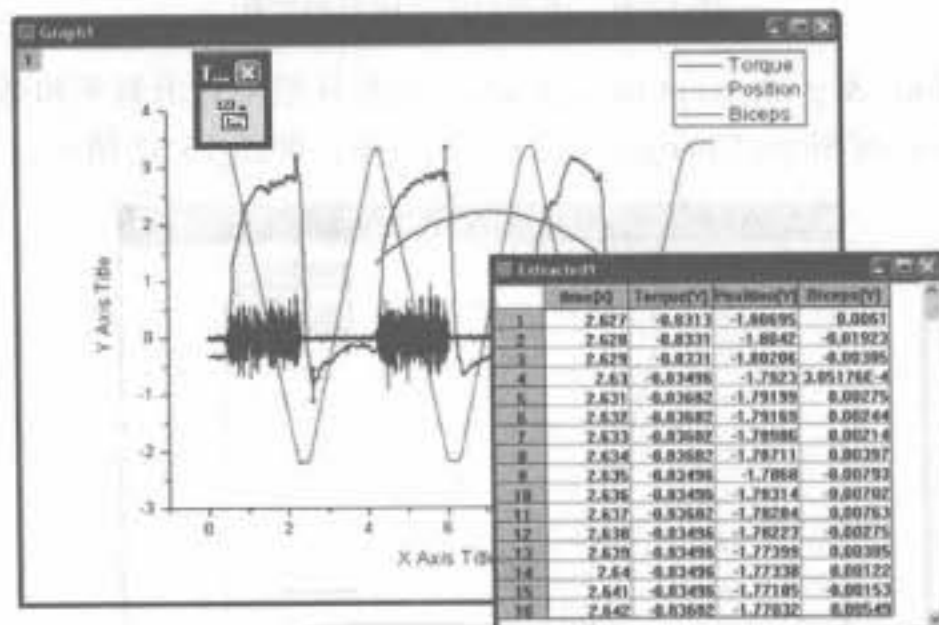


图 13.29 提取图形数据

3) Statistics on graph: 在图形中选择线段并进行数据统计, 如图 13.30 所示。

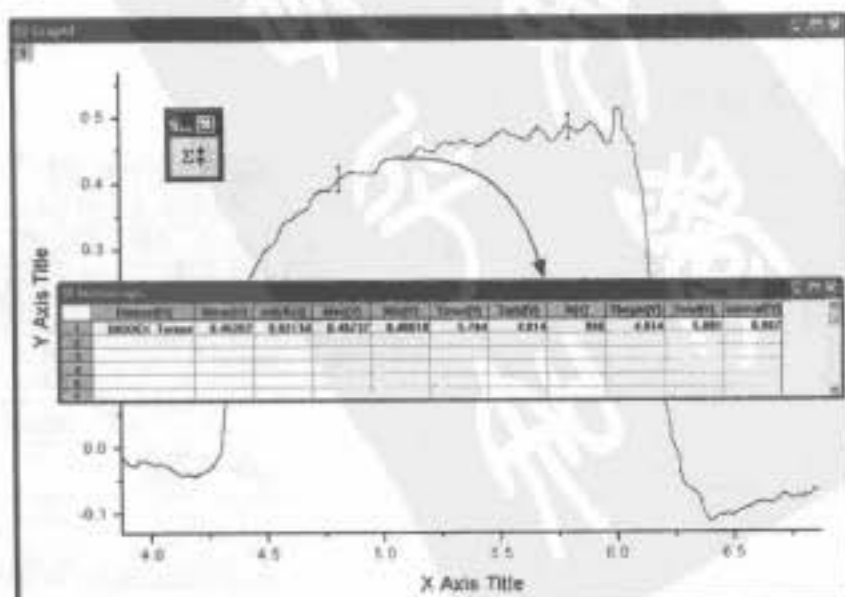


图 13.30 行统计

4) Scroll and Zoom Toolbar for Time Series Data: 滚动和缩放, 如图 13.31 所示。

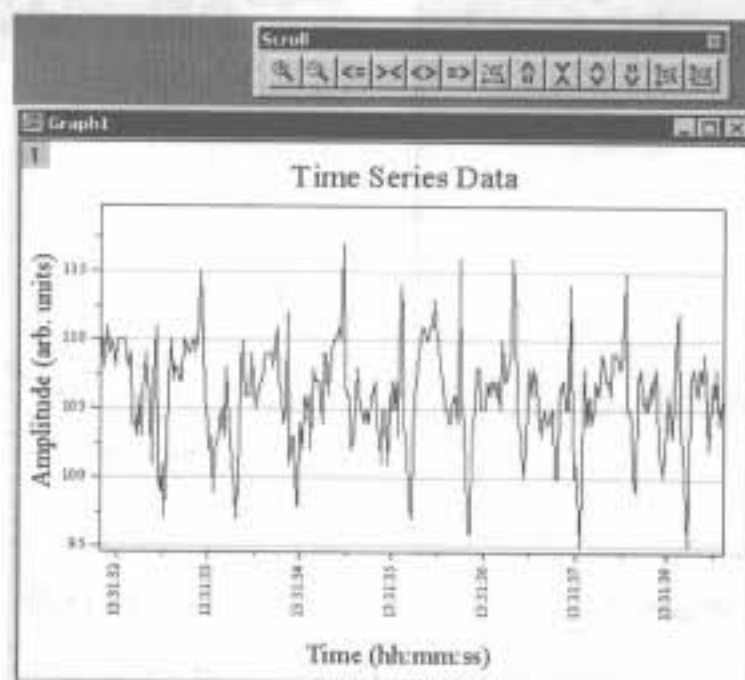


图 13.31 滚动和缩放图形的工具

5) Calculates slope & y-intercept for 2 points: 根据任意两点求斜率和截距。

6) Estimate Onset of Slope Change: 评估曲线斜率, 如图 13.32 所示。

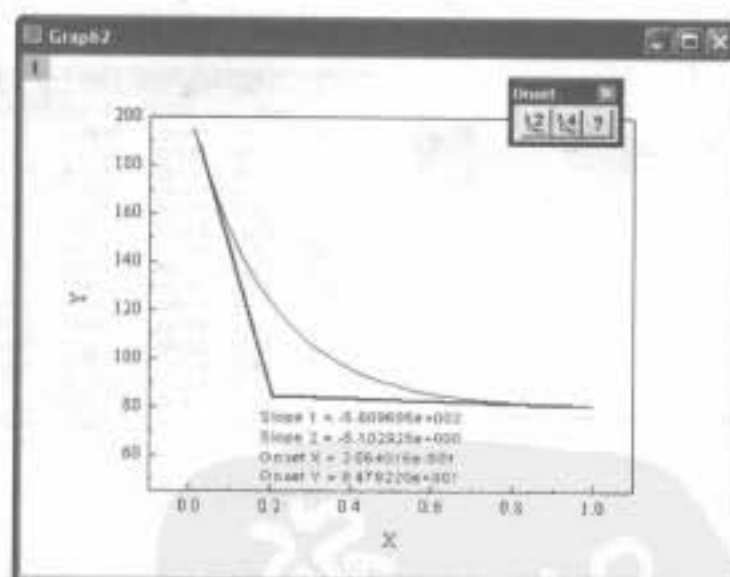


图 13.32 求曲线斜率

7) Indicator tool: 位置提示工作, 如图 13.33 所示。

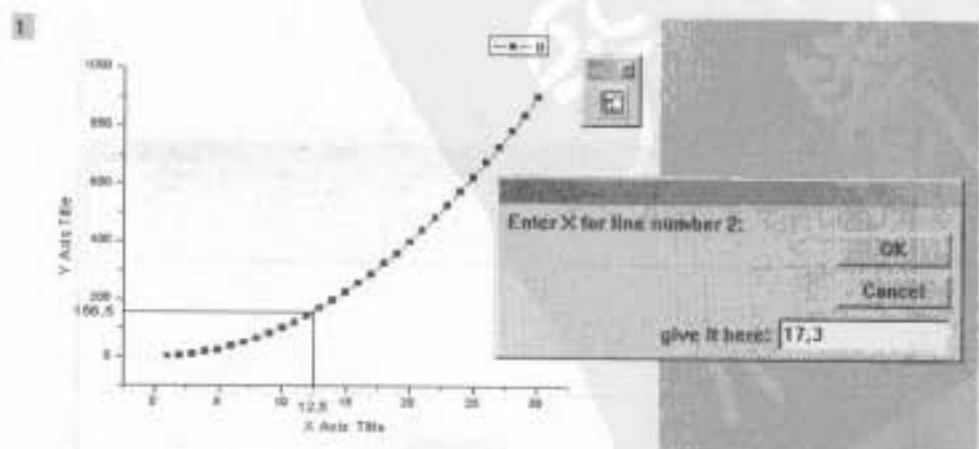


图 13.33 提示点的位置

Distance between two points on a graph: 测量曲线上两点距离, 如图 13.34 所示。

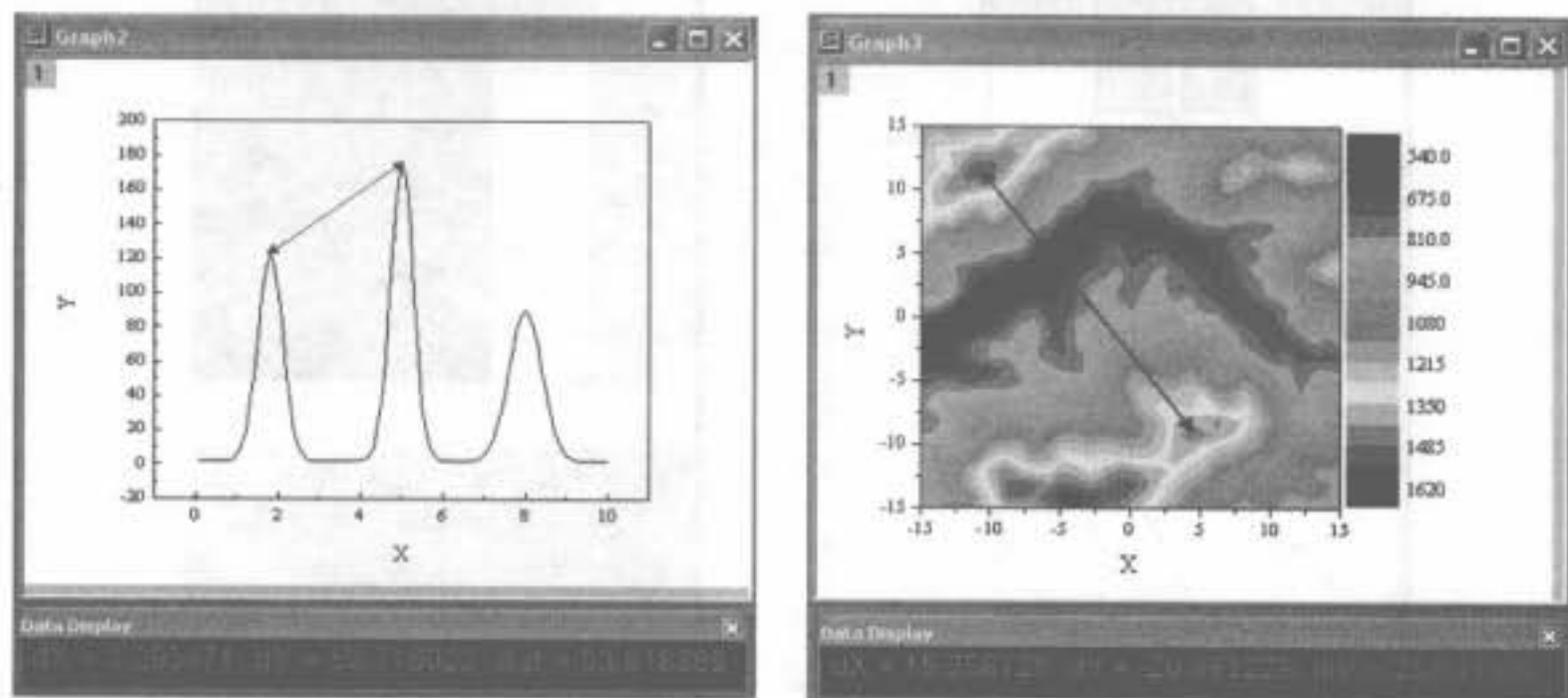


图 13.34 测两点距离

(3) Export 输出。

1) Project Catalog: 将工程导出为.chm 文件(帮助文件格式), 可以脱离 Origin 浏览, 如图 13.35 所示。

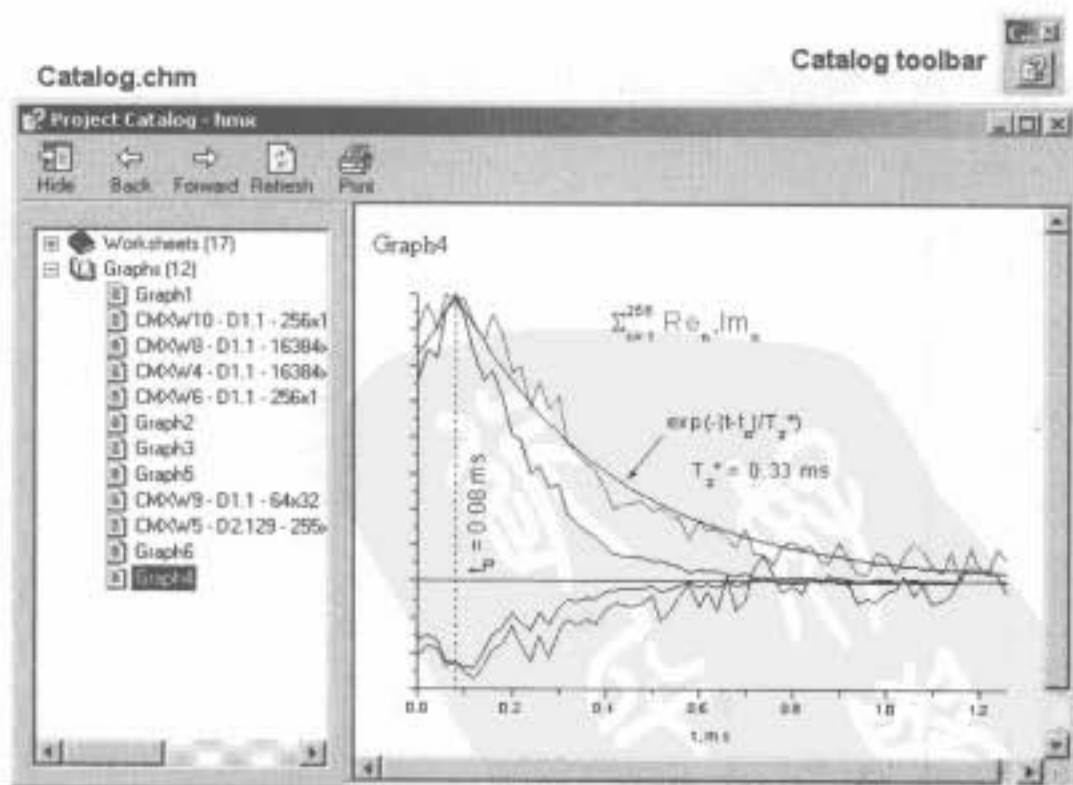


图 13.35 输出为 CHM 文件

- 2) HTML Genie: 将工程和图形输出为网页格式。
 - 3) OAnimator: 将图像输出为 GIF 动画。
 - 4) Export Graphs Tool: 输出为图形文件或 PowerPoint。
- (4) Graphing 作图。
- 1) Three Y Axis Plot: 三 Y 轴图形, 如图 13.36 所示。

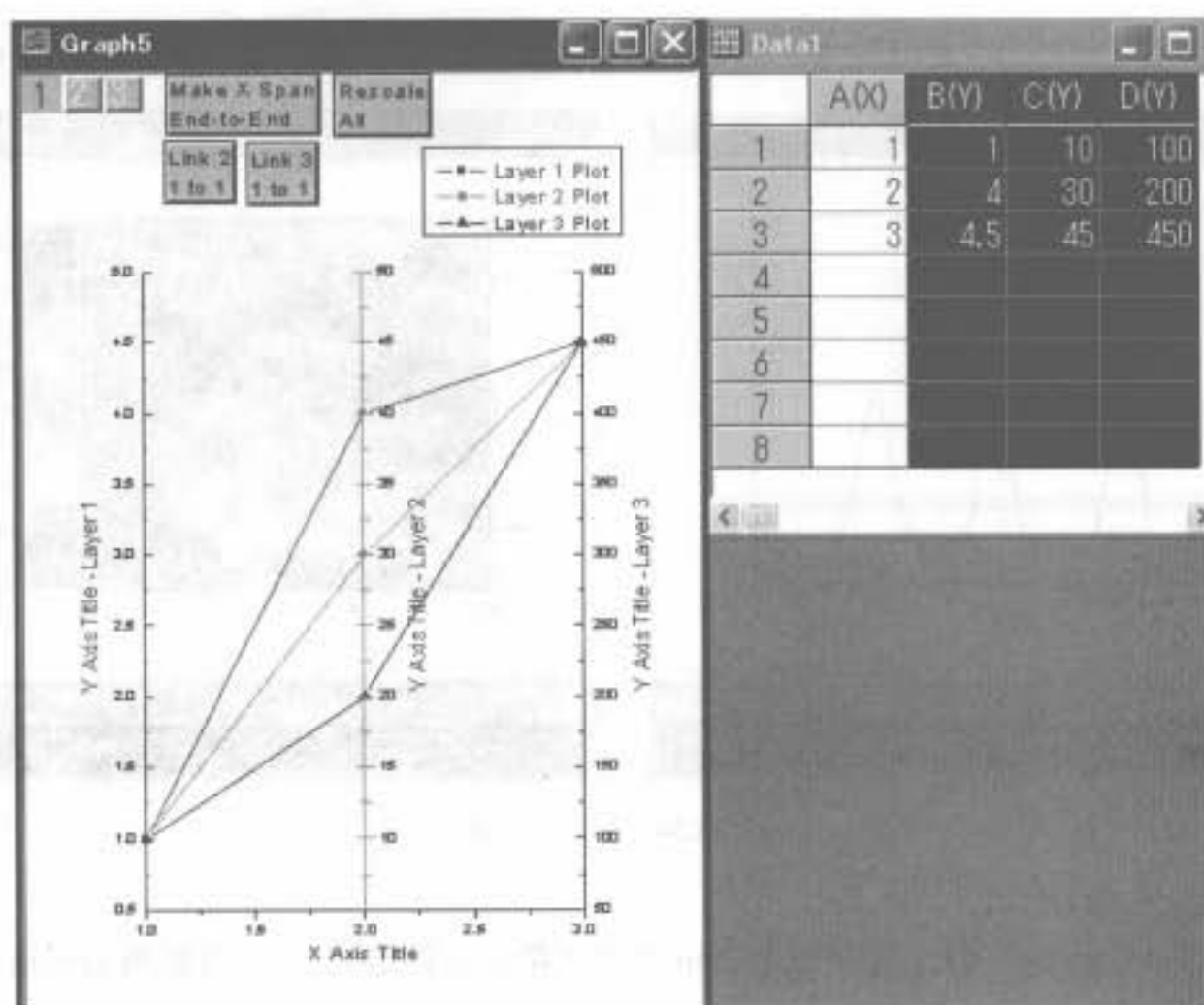


图 13.36 三 Y 轴图形

Four Y Axis Plot: 四 Y 轴的图形, 如图 13.37 所示。

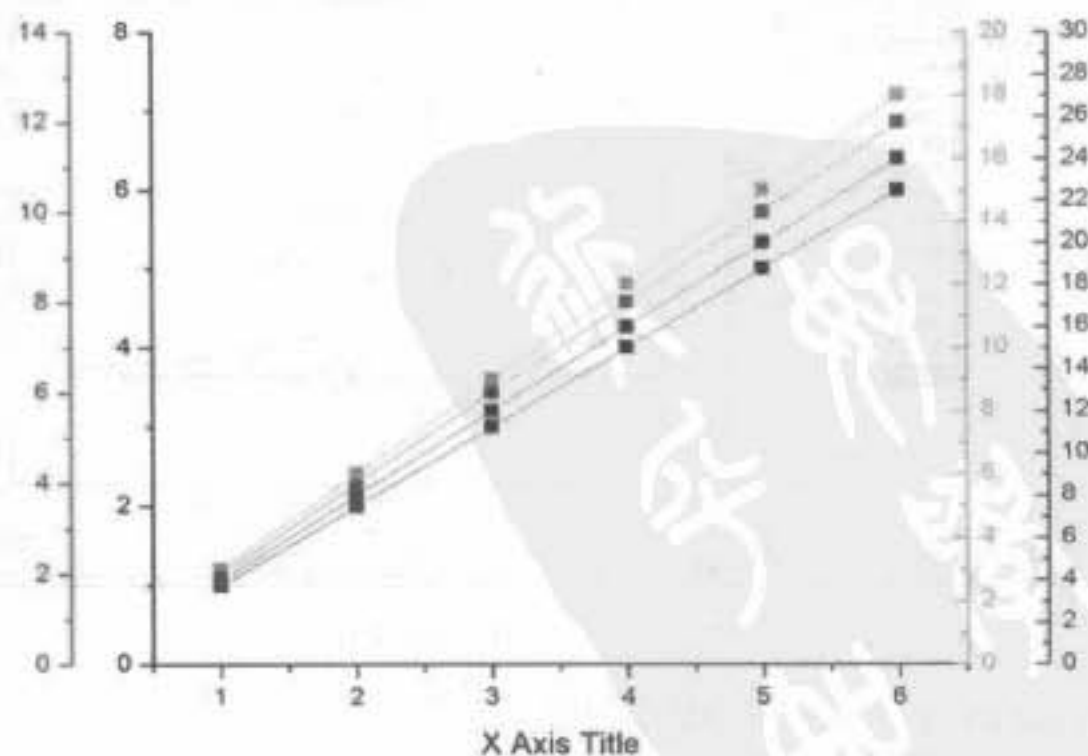
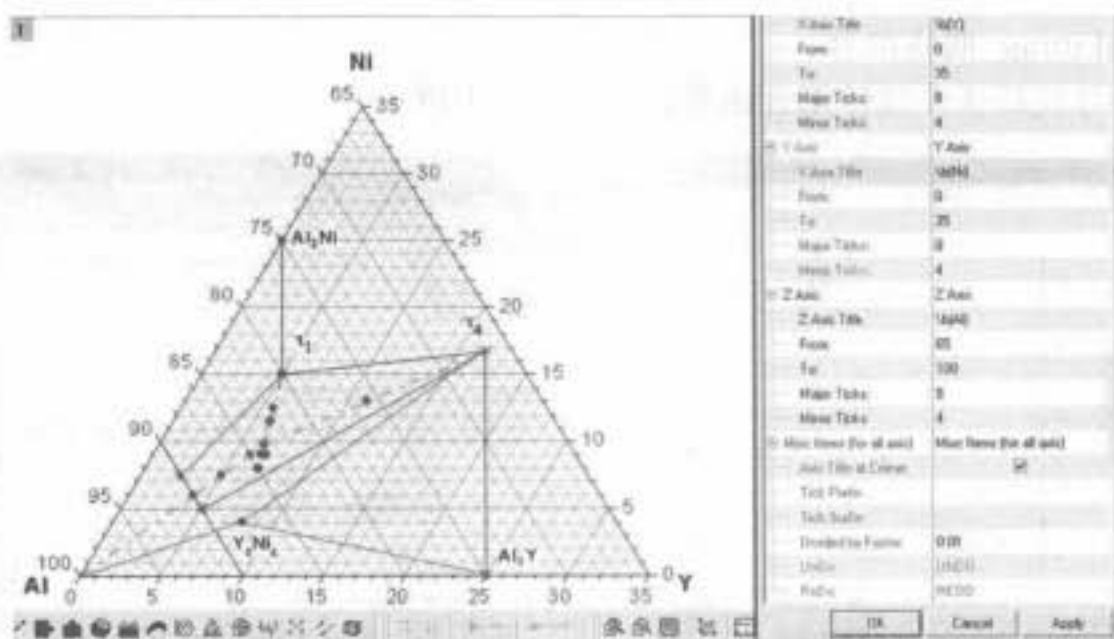


图 13.37 四 Y 轴图形

2) Scale Ternary Plot: 三元图形, 如图 13.38 所示。



13.38 三元图形

3) 2 clicks data plot moving: 通过单击移动数据点, 如图 13.39 所示。

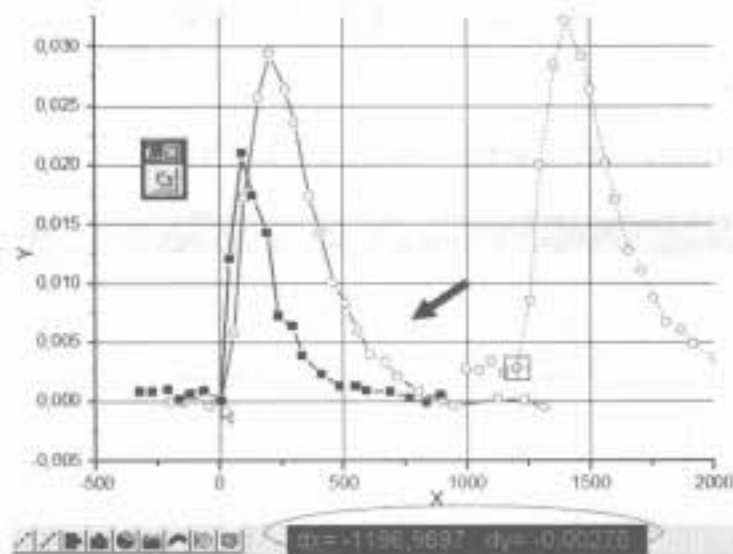


图 13.39 移动数据点

4) Moving data plot to (X,Y): 通过设置新坐标移动数据点, 如图 13.40 所示。

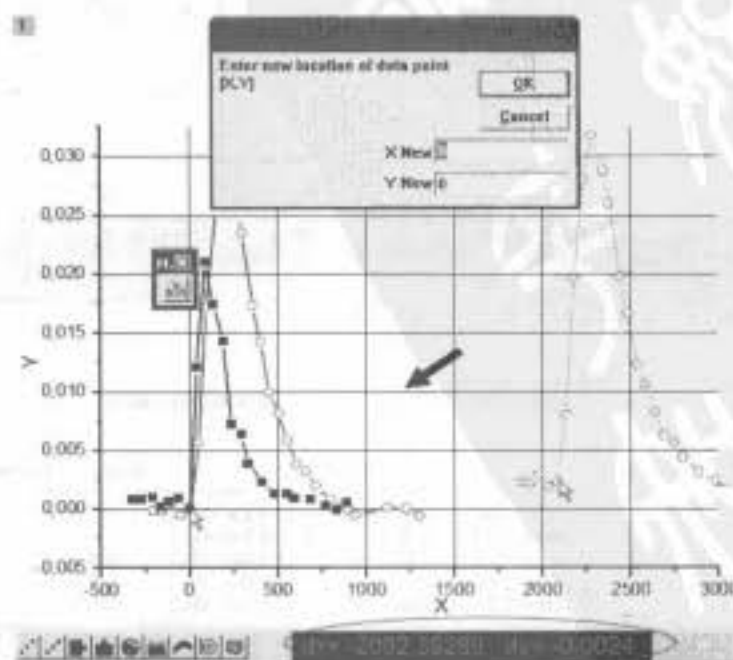


图 13.40 设定新坐标

(5) Curve Fitting 曲线拟合。

QuickFit: 寻找最佳非线性拟合函数, 如图 13.41 所示。

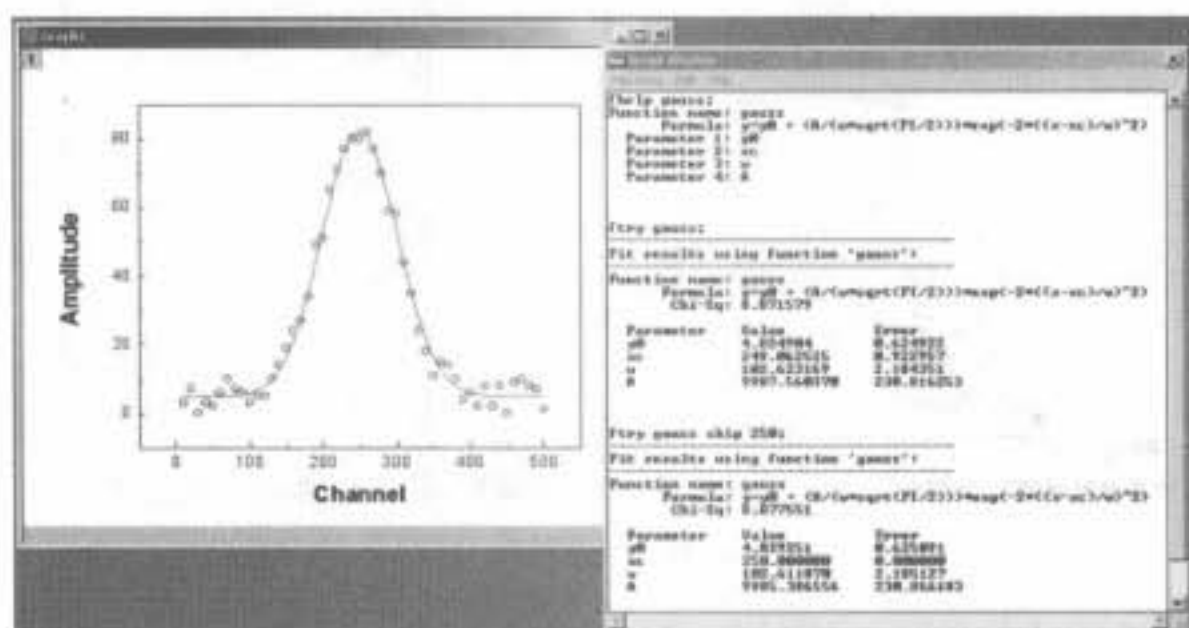


图 13.41 寻找最佳拟合函数

(6) Mathematics 数学。

Finding Roots of Equations: 方程求根, 如图 13.42 所示。

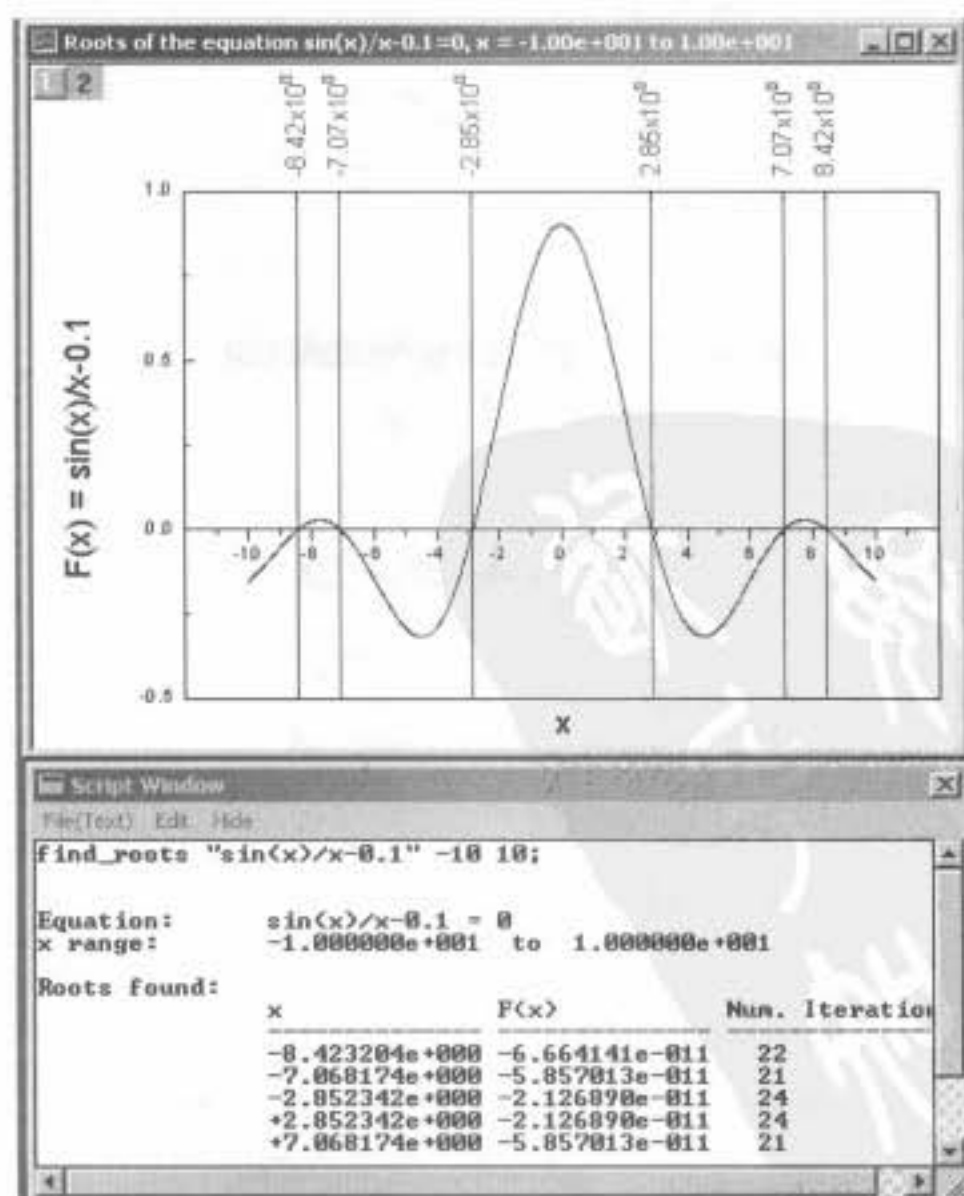


图 13.42 求根

Anima3D - 3D Function Animation: 制作三维表面图的动画, 如图 13.43 所示。

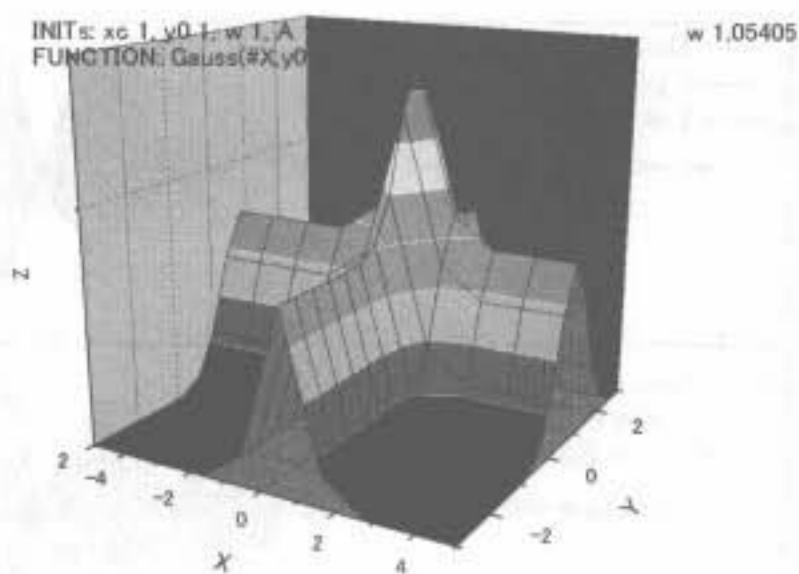


图 13.43 三维图形动画

(7) Signal Processing 信号处理。

1) Integration Tool: 积分工具, 如图 13.44 所示。

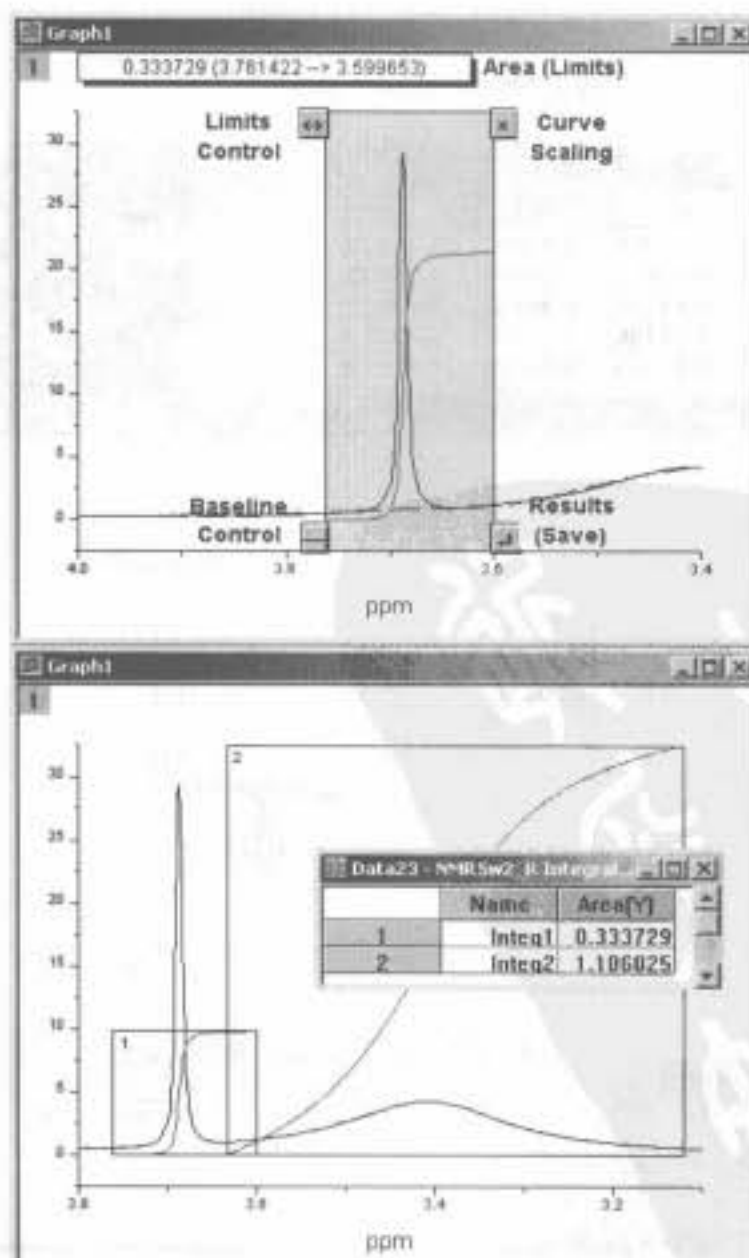


图 13.44 积分

2) Envelope Curves: 包络曲线, 如图 13.45 所示。

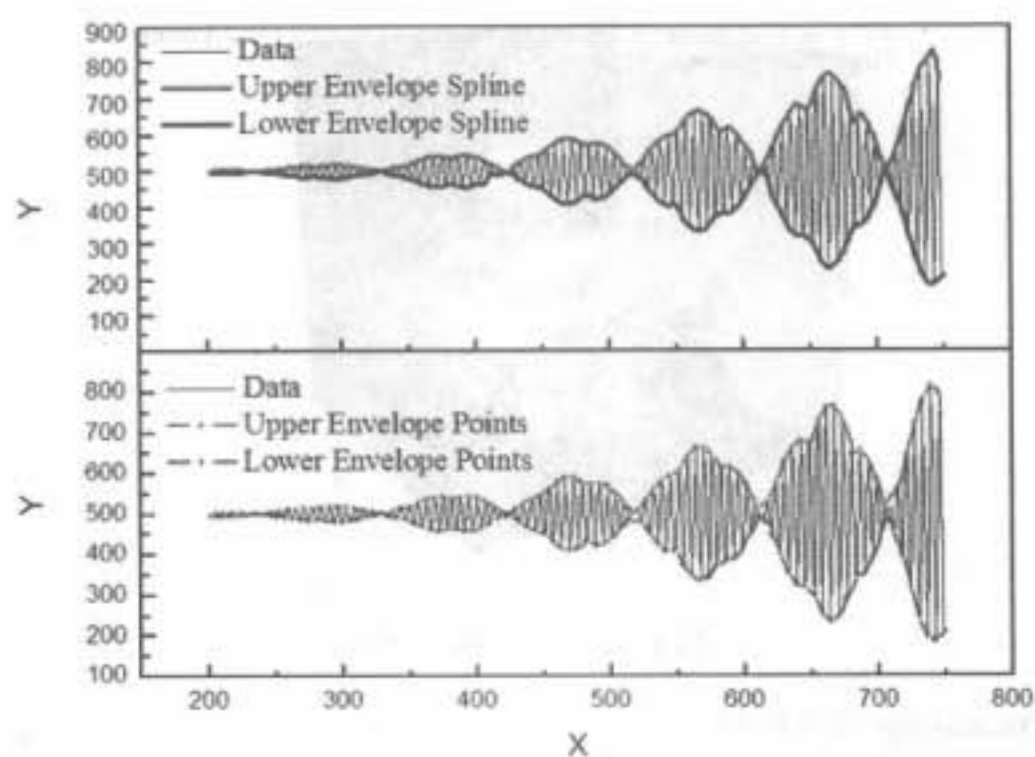


图 13.45 包络曲线

3) Median Filtering: 中值滤波, 如图 13.46 所示。

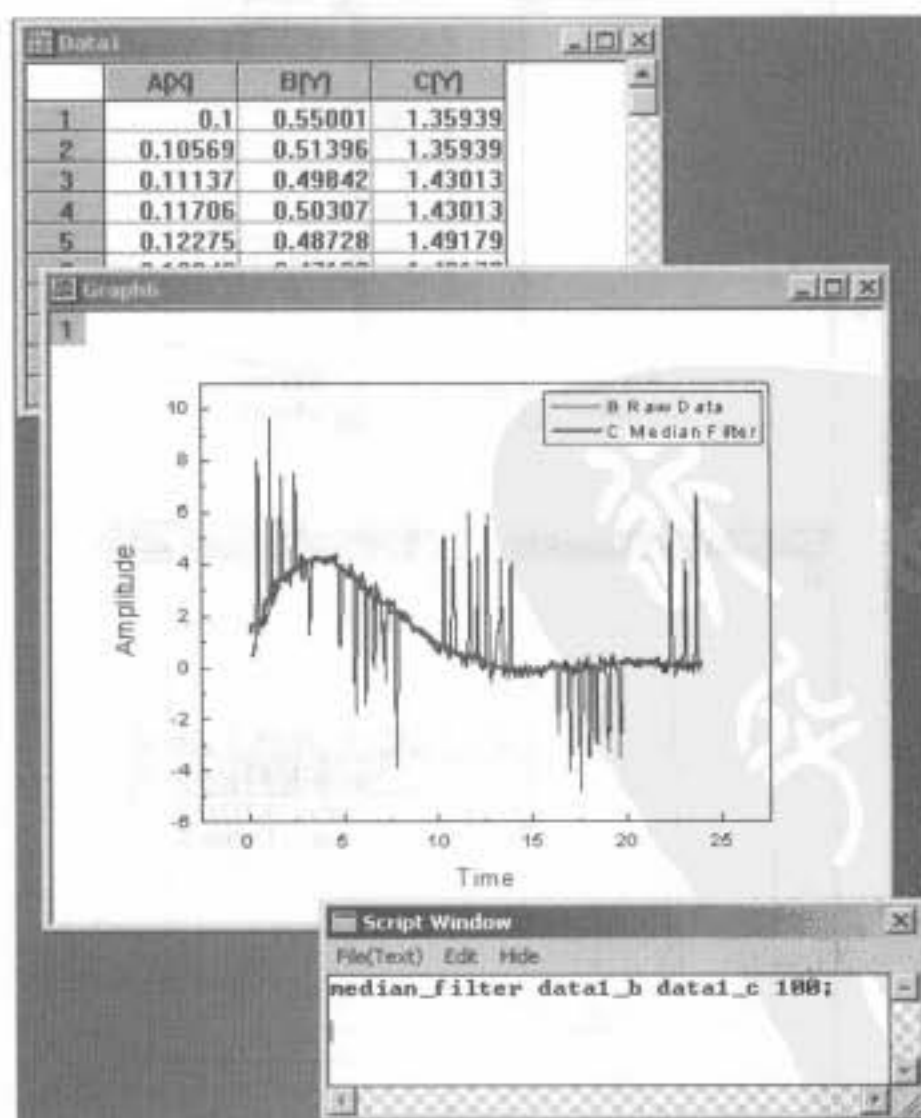


图 13.46 中值滤波

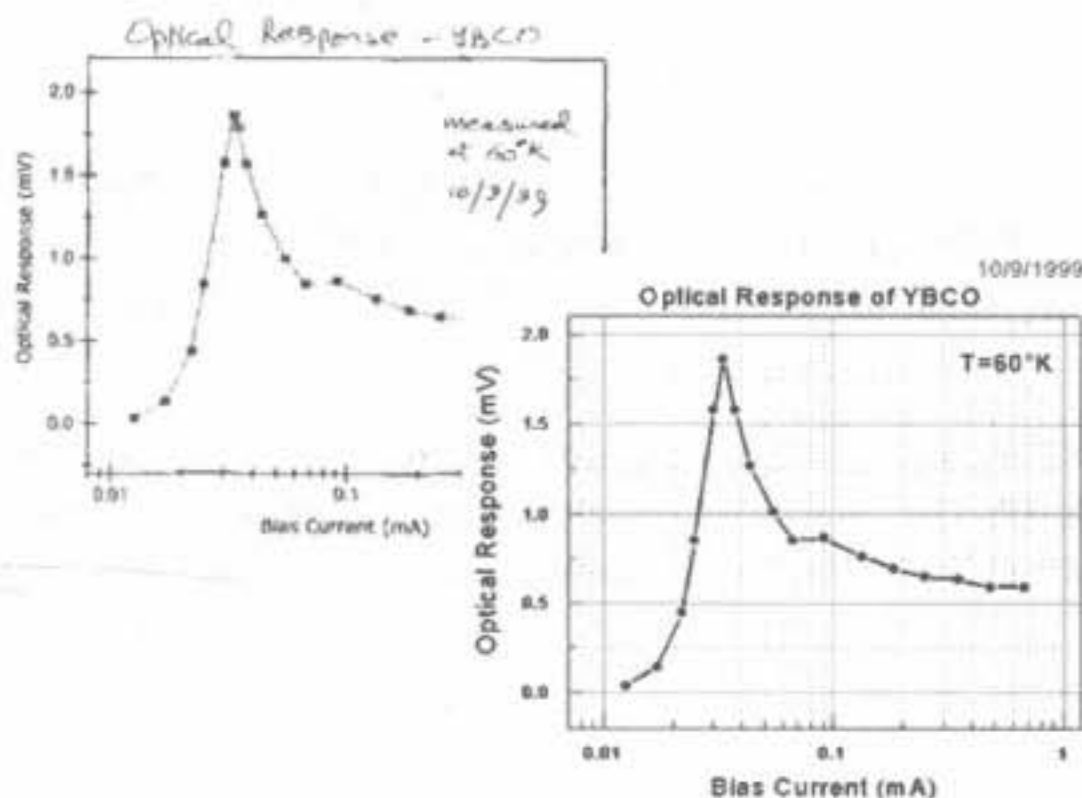
(8) Spectroscopy 色谱。

ONMR: 核磁共振谱处理。

(9) Image Processing 图像处理。

Digitizer for Origin: 从数据化图像中获取数据, 如图 13.47 所示。

Go from an image...



...to an Origin Graph!

图 13.47 从图像获取数据

从以上的介绍我们可以发现, 插件相当大程度上是为了进一步完善 Origin 的功能的。

关于插件要注意的是, 插件与版本是有关的, 有些插件在新版本安装时会提示这样或那样的错误。事实上, 上面介绍的大部分插件都是基于 7.5 版本的, 但相信随着新版本的发布, 这些功能会慢慢集成到新版本上, 或者插件的版本将会进行升级以适合于 8.0 版本, 因此安装时如果出现版本错误, 则需要等待新版本的发布。

参考文献

- [1] 方安平, 叶卫平等. Origin 7.5 科技绘图及数据分析. 北京: 机械工业出版社, 2006
- [2] 周剑平. 精通 Origin 7.0. 北京: 航空航天大学出版社, 2005
- [3] 郝红伟等. Origin 6.0 实例教程. 北京: 中国电力出版社, 2000

网络资源

- [1] Origin 8 User Guide. http://www.originlab.com/pdfs/Origin_8_User_Guide.pdf
- [2] Origin 8 Help File. <http://www.originlab.com/www/helponline/origin8/en/origin.htm>
- [3] Origin 8 Multimedia Tutorials. <http://www.originlab.com/index.aspx?s=9&lm=72>

