# PIERWSZE KROKI W ORIGIN LAB



# ĆWICZENIA NA ZAJĘCIA Z TECHNOLOGII INFORMACYJNÝCH

(na bazie OriginPro 8.5)

#### WSTĘP

Jednym z dodatkowych elementów kursu Technologii Informacyjnych jest zaznajomienie się z podstawowymi funkcjami oprogramowania OriginLab **OriginPro**. Znajomość oprogramowania pozwala na lepsze zarządzanie danymi liczbowymi, ich wizualizacją w formie graficznej oraz dopasowywaniu modeli matematycznych (od funkcji liniowych, przez większość standardowych funkcji nieliniowych, statystycznych, potęgowych aż po definiowanie własnych funkcji).

Celem tych materiałów jest nauczenie czytelnika przeszukiwania dużych zbiorów danych liczbowych, wizualizacji dwu- i trój-wymiarowej odczytanych danych, przeprowadzania operacji statystycznych (np. średnie, odchylenia standardowe) na danych, dopasowywania funkcji liniowych do danych, dopasowywania funkcji nieliniowych metodą skończonych kwadratów, definiowania własnych funkcji oraz prostego skryptowania.

#### ZAPOZNANIE SIĘ ZE ŚRODOWISKIEM

Środowisko oprogramowania Origin składa się z trzech głownych części :

- Część głowna (oznaczona na grafice "1") w tej części zlokalizowane są wszystkie aktywne nieukryte skoroszyty (workbook), wykresy, macierze, funkcje i ich wizualizacje, układy stron oraz notatki.
- 2. Eksplorator projektu (oznaczona na grafice "2") w tej części można łatwo przemieszczać się po projekcie, jeśli zawiera on wiele folderów i podfolderów. W górnym okienku znajduje się drzewko folderów, które umożliwia łatwe przemieszczanie się pomiędzy lokalizacjami w projekcie. W dolnym okienku wyświetlane są wszystkie elementy znajdujące się w danej lokalizacji projektu. W razie przypadkowego ukrycia eksploratora,

można łatwo go ponownie przywrócić poprzez [View->Project Explorer] albo kombinacją Alt+1, komenda ta może też być wykorzystana do ukrycia tej części w razie braku miejsca na ekranie. Można go również właczyć Ζ górnego paska narzędzi.



 Paski narzędzi – pozostałą część środowiska stanowią paski narzędzi służące do (u góry) tworzenia nowych składowych projektu, zapisu projektu i importu danych, (po lewej) zoomowania, przeszukiwania, maskowania wykresów, dodawania tekstu oraz grafiki do wykresów oraz (u dołu) szybkiej wizualizacji danych.

# ZADANIE 1 – MÓJ PIERWSZY WYKRES

Po włączeniu programu należy usunąć okienko Book1 klikając X i zaznaczając Delete. Dodatkowo należy w Eksploratorze Projektu kliknąć PPM na Folder1 i zmienić nazwę na Zadanie01.

# BARDZO WAŻNE !! Program Origin mimo licznych zalet ma ogromną wadę, ma tendencję do zawieszania się w najmniej odpowiednim momencie. Dlatego należy, dla własnego dobra, ZAPISYWAĆ SWÓJ PROJEKT JAK NAJCZĘŚCIEJ.

Głównym nośnikiem danych w programie Origin jest skoroszyt. Jest to okienko składające się z odpowiednio określonych kolumn (jako współrzędne X, Y, Z lub ich niepewności pomiarowe). Skoroszyt można stworzyć klikając na ikonkę

{**New Workbook**} na górnym pasku zadań albo klikając

PPM w dolnym okienku eksploratora projektu i wybierając [*New Window -> Worksheet*]. W oknie eksploratora projektu należy zmienić nazwę nowo utworzonego skoroszytu na 01Skoroszyt.

Każdy skoroszyt może dzielić się na zakładki/arkusze (sheets), które są od siebie niezależne. W celu dodania nowego arkusza należy kliknąć PPM na obecny arkusz (przeważnie Sheet1) i wybrać opcję Add (dodaje nowy arkusz na końcu "kolejki") lub Insert (dodaje nowy arkusz przed zaznaczonym). W ten sposób można też zduplikować istniejący arkusz, przesunąć go lub zmienić mu nazwę (Rename).

Jeśli chodzi o sam arkusz, domyślnie składa się on z trzech kolumn – pierwszej porządkowej, na której znajduje się numer wiersza, drugiej zdefiniowanej jako współrzędne X i trzeciej zdefiniowanej jako współrzędne Y. Dodatkowe kolumny można dodać poprzez kliknięcie na szare pole za kolumnami i wybierając {**Add New Column**} lub zaznaczając całą kolumnę - LPM na nagłówek kolumny, np. A(X) – i zaznaczając Insert. Druga opcja doda kolumnę przed zaznaczoną.

Określone kolumny są domyślnie ustawione jako współrzędne kolejno X i Y. W celu zmiany należy zaznaczyć całą kolumnę (LPM na nagłówek kolumny), znaleźć opcję {**Set As**} i wybrać interesującą nas opcję. Dane do określonej komórki wprowadza się podobnie jak w Excelu. 01Skoroszyt należy sformatować i uzupełnić zgodnie z poniższym przykładem:

🛄 Book1 - 01SI	koroszyt				×	ľ	🛄 Book1 - 01Sk	coroszyt				× )	ľ	🛄 Book1 - 01S	koroszyt				x
	A(X)	B(Y)	C(Z)	D(yEr±)	<u>^</u>			А	B(X)	C(Y)		*			A(X1)	B(Y1)	C(X2)	D(Y2)	<b>^</b>
Long Name	WspX	WspY	WspZ	Y Error			Long Name	Blank	WspX	WspY				Long Name	Pierwszy X	Pierwszy Y	Drugi X	Drugi Y	
Units	[a/u]	[cm]	[dm]	[cm]			Units					-		Units					-
Comments							Comments	Disregarded				-		Comments					-
1							1	3	1	1				1					
2			[		-		2	3	2	4				2					
3					=		3	3	3	9				3					
4							4	3	4	16				4					
5							5	3	5	25				5					
6							6	3	6	36				6					
7							7	3	7	25				7					
8							8	3	8	16				8					
9							9	3	9	9	l.			9					
10							10	3	10	4				10					
11							11							11					
12	(	1					12					-		12	1				-
Trening \ Trening	Obróbki	🖌 Skoroszyt	ów /    <		►i		<u> </u>	) <u>}</u> Obróbki <u>{</u> S	Skoroszytów	/    < 🗆	4 III	at		I → \ Trening	) 🖌 Obróbki	A Skoroszyto	ów/    <		► at

Po skończeniu formatowania należy przejść do arkusza Obróbki, zaznaczyć kolumnę odpowiadającą za współrzędne Y i z dolnego paska narzędzi wybrać opcję Line w celu stworzenia wyresu liniowego. Należy zmienić nazwę nowo utworzonego wykresu na 01Wykres.

### ZADANIE 2 – METODY WPROWADZANIA DANYCH

Należy utworzyć katalog Zadanie02 w katalogu głownym projektu. Można to uczynić przechodząc do katalogu głównego i tworząc nowy folder w dolnym oknie lub bezpośrednio kliknąć PPM na katalog główny i wybrać {**New Folder**}. Należy w nowoutworzonym katalogu stworzyć Skoroszyt o nazwie 02Skoroszyt, który zawierać będzie jeden arkusz o nazwie Arkusz1 i sześć kolumn – kolejno o współrzędnych X i Y.

W kolumnie A wprowadzimy dane poprzez opcję {**Set Column Values**}. Zaznaczamy kolumnę i wybieramy wspomnianą opcję. U góry wprowadzamy interesujący nas zakres wierszy, w naszym przypadku będzie to od 1 do 360. Zmienną symbolizującą numer wiersza jest i. W celu otrzymania prostej iteracji definiujemy zawartość kolumny jako:

#### Col(A)=i\*Pi/180

co będzie odpowiadało konwersji numeru wiersza – stopnia – na radiany. Przyciskami obok Col(A) mamy możliwość szybkiego przechodzenia pomiędzy kolejnymi kolumnami. Skorzystajmy z tej opcji (Przycisk {>>} ) i zdefiniujmy zawartość kolumny B jako:

Zamknijmy okno wprowadzania danych. Jest to jeden ze sposobów ich wprowadzania.

Drugim sposobem wprowadzania danych jest skorzystanie z jednej z trzech zdefiniowanych już odgórnie sposobów wprowadzania danych. Kliknijmy PPM na nagłówek kolumny C i wybierzmy opcję {**Fill Column with -> Row Numbers**}. Zapełni to kolumnę numerami wiersza do końca jej długości. Opcja ta wymaga wcześniejszego określenia liczby wierszy (np. poprzez znalezienie interesującego nas końcowego wiersza i wybranie mu opcji {**Set as End**}). Zapełnijmy jeszcze kolumnę D w podobny sposób wybierając albo {**Uniform Random Numbers**} – pseudolosowymi liczbami od 0 do 1 – albo {**Normal Random Numbers**} – pseudolosowymi liczbami z rozkładu normalnego zdefiniowanego w pliku konfiguracyjnym Origin.ini parametrami  $\mu$ =0 i  $\sigma$ =1. Niezależnie od wyboru, po wprowadzeniu danych należy je przesortować od najmniejszej do największej wartości (Ascending order), co można zrobić poprzez PPM na kolumnę, a następnie [*Sort Column -> Ascending*].

Trzecim sposobem wprowadzenia danych jest wykorzystanie okienka konsolowego (Command Line). Można go włączyć z [Window->Command Window] lub wykorzystując skrót klawiszowy Alt+3. W celu uzupełnienia kolumny E wprowadzamy komendę:

#### Col(E) = {1:0.5:180}

Zwróćmy uwagę na zapis. Pierwsza liczba oznacza wartość początkową, druga liczba jest krokiem, czyli wartością o jaką różnią się kolejne, a ostatnia jest wartością końcową. Umożliwia nam to precyzyjne określenie zakresu liczbowego oraz znacznie prostszej definicji

UWAGA -Col(A) jest już wpisane w okienku, należy tylko wpisać prawą część równania kroku niż w podejściu 1. Nie mamy jednak możliwości bezpośrednio odwołać się do numeru wiersza. Zdefiniujmy kolumnę F jako iloczyn kolumny B i D za pomocą komendy:

Wszystkie operacje matematyczne są dozwolone – dodawanie, odejmowanie, dzielenie (/), potęga (^), zaokrąglanie (round()) i wiele innych. Zamiast notacji literowej można również stosować notację liczbową Col(1) – pierwsza kolumna, Col(2) – druga kolumna, itd.

Na koniec zadania przedstaw każdy ze zbiorów XY jako kolejno wykres liniowy (Line), punktowy (Scatter) oraz liniowo-punktowy (Line+Symbol). Są to kolejne trzy wizualizacje na dolnym pasku narzędzi albo alternatywnie można skorzystać u góry z menu Plot i wybrać docelowe pozycje. Każdy wykres nazwij odpowiednio – 02WykresAB, 02WykresCD i 02WykresEF.

# Pamiętaj by ZAPISYWAĆ SWÓJ PROJEKT JAK NAJCZĘŚCIEJ!

# ZADANIE 3 – FORMATOWANIE WYKRESU DWUWYMIAROWEGO

 Utworzyć katalog Zadanie03 w katalogu głownym projektu. Należy w nowoutworzonym katalogu stworzyć Skoroszyt o nazwie O3Skoroszyt, który zawierać będzie jeden arkusz, w którym będą dwie kolumny – kolejno o współrzędnych X i Y.

• W kolumnie ze współrzędnymi X wprowadzić dowolną metodą wartości od 0 do 1000 z krokiem 10 (inaczej: 10\*numer\_wiersza), natomiast w kolumnie Y wartości powinny odpowiadać funkcji 1/X^3, gdzie X to wartości z kolumny ze współrzędnymi X.

 Nadać nazwę (Long Name) kolumnie X Wartości, a jej jednostki zdefiniować jako a/u, a kolumnie Y nazwę Funkcja, a w miejsce jednostek wstawić -.

• Stworzyć wykres punktowy (Scatter Plot). Zmienić jego nazwę na 03Wykres.

Wykresy w Originie można formatować za pomocą skryptów lub interaktywnie. Jednakże pisanie skryptów w Originie wymaga podstawowej znajomości jezyków C i C++, dlatego zostanie opisane tylko formatowanie interaktywne.

W celu zmiany opisów osi wynikających z opisu w skoroszycie należy kliknąć dwukrotnie na

opis i go edytować.	The Default: A -	22	J.	R 7	тт	- <sup>2</sup>	x <sup>2</sup> nB	<b>∆</b> ^∧`	' = -	 A	•
Pozwala nam to na	T Deladic A 🕈	~~	· ·	D 1	<u> </u>	<u>-</u> 2	~1 up /	n "		 	Ċ

bardziej precyzyjny opis i używanie symboli greckich (alternatywnie **Ctrl+G**). Zaznaczmy opis osi Y i zedytujmy go jako Odwrotnosc  $X \equiv A_3^2$  (Polecam wpisać XXA a następnie zaznaczyć środkowe X i dopiero wtedy zaznaczyć przycisk symboli greckich).

W celu edytowania osi należy kliknąć PPM myszy na dowolną oś lub liczby ją opisującą i wybrać opcję {Properties}. W oknie po lewej możemy doprecyzować o edytowanie której osi nam chodzi. W zakładce Scale definiujemy zakres widoczny na wykresie (od – do) oraz typ osi. Ustalmy typ osi Y na Log10 i ustawmy wyświetlanie danych od 1E-9 do 0.001. Przejdźmy na zakładkę Tick Labels gdzie możemy zdefiniować format, w jakim wyświetlane są opisy osi. Przejdźmy do zakładki Display i wybierzmy zapis naukowy (Scientific). Typ osi X również ustawmy na Log10, a zakres na 10 – 1000. Zostawmy dziesiętny zapis w przypadku osi X.

W celu zmiany wyglądu punktów (bądź linii) klikamy PPM na dowolny punkt na wykresie i wybieramy {**Plot Details**}. Można tu wybrać symbol, który będzie wykorzystywany w wykresie. Należy wybrać dowolny (za wyjątkiem domyślnego) oraz powiększyć go do 15. Należy także zmienić kolor krawędzi i kolor wypełnienia na dwa dowolne (za wyjątkiem domyślnych) różniące się kolory.

Obiekty na wykresie można dowolnie przesuwać i zmieniać ich rozmiar. Wystarczy kliknąć na obiekt by pojawiło się osiem charakterystycznych kwadratów służących do zmiany rozmiaru. Należy przesunąć okienko z legendą by znajdowało się ono pod linią wytyczoną przez punkty funkcji. W celu umieszczenia na wykresie okienka z tekstem klikamy w dowolnym miejscu PPM na wykresie i wybieramy {**Add Text...**}. Umieszczamy tekst o treści "TEXT" nad okienkiem legendy.

# ZADANIE 4 – INNE WYKRESY 2D I UKŁAD STRONY

• Utworzyć katalog Zadanie04 w katalogu głownym projektu. Należy w nowoutworzonym katalogu stworzyć Skoroszyt o nazwie 04Skoroszyt. Zawartość, liczba arkuszy i format skoroszytu dowolny, ważne by w danym folderze był tylko jeden skoroszyt.

• Wprowadzić odpowiednie dane, stworzyć i sformatować wykresy by otrzymać poniższe wykresy (wartości liczbowe i kolory mogą się różnić). Każdy wykres nazwać zgodnie z wcześniejszą notacją, tzn. 04Wykres1, 04Wykres2, itd.







Nie każdy symbol ma możliwość ustawiania koloru krawędzi i wypełnienia.





Plot->Symbol-> XY Error

Przed tworzeniem wykresu należy zaznaczyć wszystkie 3 kolumny -> Y, Error Y i Error X, należy kolumny odpowiednio ustawić. Wartości to Uniformed Random Numbers. Plot->Line-> Spline Connected

Przed tworzeniem wykresu należy zaznaczyć wszystkie 3 kolumny Y. Kolumny te mają mieć tylko jedą wspólną odpowiadajacą im kolumnę X.

W komórkach, podobnie jak w Excelu, nie muszą być wprowadzane wartości liczbowe – można także wprowadzić tekst i w przeciwieństwie do Excela, Origin radzi sobie z tym całkiem dobrze. Np. w przypadku wykresu kolumnowego można dane wprowadzić w następującej formie, dzięki czemu uzyskamy wykres przedstawiony obok:

A(X)	B(Y)
Kolumna1	10
Kolumna2	15
Kolumna3	12



• Utworzyć nowy układ strony (Layout)

 Nazwać go 04Uklad. Kliknąć PPM na stronę w okienku Layout, wybrać {Add Graph}. Następnie zaznaczyć i przeciągnąć kursor by zaznaczenie pokryło docelowy opszar. Po kolei wprowadzić stworzone wykresy tak by każdy z nich zajmować ćwiartkę strony, jak zademonstrowano na rysunku obok.

Piconer of boortease () () () () () () () () () ()	Excited of bronche pass the stand of bronche pa

# Pamiętaj by ZAPISYWAĆ SWÓJ PROJEKT JAK NAJCZĘŚCIEJ!

# ZADANIE 5 – WYKRESY 3D I 2.5D

Wykresy trójwymiarowe tworzy się identycznie jak np. wykres XY Error, tylko jedną z kolumn definiuje się jako zmienną Z.

• Utworzyć katalog Zadanie05 w katalogu głownym projektu. Należy w nowoutworzonym katalogu stworzyć Skoroszyt o nazwie 05Skoroszyt. Zawartość, liczba arkuszy i format skoroszytu dowolny, ważne by w danym folderze był tylko jeden skoroszyt.

• Wprowadzić odpowiednie dane, stworzyć wykresy by otrzymać poniższe wykresy (wartości liczbowe i kolory mogą się różnić). Każdy wykres nazwać zgodnie z wcześniejszą notacją, tzn. 04Wykres1, 04Wykres2, itd.



Plot -> 3D XYZ -> 3D Scatter Trzy kolumny: X = {1:1:10}, Y={1:1:10}, Z={1:1:10}

	A(X)	B(Y)	C(Z)
Long Name	Х	Y	Z
Units			
Comments			
1	1	1	1
2	2	2	2
3	3	3	3
4	4	4	4
5	5	5	5
6	6	6	6



#### Plot -> Multi-Curve -> Waterfall

Konieczna zmiana wiersza Comments na Parameters (PPM na nazwę i {Set as Parameters}. Cztery kolumny: X={0:1:10}, Y1={0:1:10}, Y2={0:2:20}, Y3={0:3:30}

	A(X)	B(Y)	C(Y)	D(Y)
Long Name	Х	Y1	Y2	Y2
Units				
Parameters		3	2	1
1	0	0	0	0
2	1	1	2	3
3	2	2	4	6
4	3	3	6	9
5	4	4	8	12
6	5	5	10	15

#### Plot -> 3D XYY -> 3D Bars Trzy kolumny:

#### X={1:1:10}, Y1={1:1:10}, Y2={10:-1:1}

	A(X)	B(Y)	C(Y)
Long Name	Х	Y1	Y2
Units			
Comments			
1	1	1	10
2	2	2	9
3	3	3	8
4	4	4	7
5	5	5	6
6	6	6	5

# ZADANIE 6 – DOPASOWYWANIE LINIOWE

Funkcja liniowa w Originie jest opisana wzorem y = a + b\*x, czyli a jest wyrazem wolnym, natomiast b jest współczynnikiem kierunkowym. Przy dopasowywaniu należy zwracać na to szczególną uwagę, gdyż - zależnie od stosowanego programu – wartości te mogą być odwrotnie opisane.

• Utworzyć katalog Zadanie06 w katalogu głownym projektu. Należy w nowoutworzonym katalogu stworzyć Skoroszyt o nazwie 06Skoroszyt, który zawierać będzie jeden arkusz, w którym będą dwie kolumny – kolejno o współrzędnych X i Y.

• Otworzyć okienko konsolowe i wpisać następujące linijki:

$$Col(1) = \{1:1:50\}$$

$$Col(2) = 2*Col(1) + 5 + grnd()$$

Grnd() losuje liczbę z wcześniej opisanego rozkładu normalnego (Normal Random Numbers).

• Nadać nazwę (Long Name) kolumnie X **Argumenty**, a kolumnie Y nazwę **Zbiór Wartości**. Stworzyć wykres punktowy (scatter) i nazwać go 01Wykres1.

• Zaznaczyć punkty na wykresie, a nastepnie w górnym menu wybrać [Analysis -> Fitting -> Linear Fitting -> Open Dialog].

W danym oknie możemy zadefiniować dane, które będziemy wykorzystywać w dopasowywaniu liniowym. Nie jest to jednak konieczne, gdyż zaznaczyliśmy je poprzez zaznaczenie punktów na wykresie. W [Quantities to Compute -> Fit Parameters] możemy zaznaczyć jakie parametry szukanych wartości wyrazu wolnego i współczynnika kierunkowego nas interesują (domyslnie zaznaczona jest wartość i odchylenie standardowe). W [Quantities to Compute -> Fit Statistics] możemy zaznaczyć, czy chcemy by przeprowadzona została statystyka na punktach i jeśli tak – jakie wartości statystyczne chcemy otrzymać (np. Liczba punktów czy współczynnik determinacji R<sup>2</sup>). W [Quantities to Compute -> Fit Summary] określamy czy chcemy mieć podsumowanie i co ma się w nim znaleźć. Czasem chcemy orientacyjnie graficznie określić miejsce przecięcia się dwóch funkcji liniowych. By rozszerzyć zakres modelu funkcji liniowej który dopasowywujemy, w [Fitted Curve Plot -> X Data Type -> Range] wybieramy {**Span to Full Axis Range**}. Istnieje więcej możliwych ustawień dopasowywania, ale znajomość wyżej wymienionych wystarczy w większości przypadków. By wykonać dopasowanie wciskamy przycisk {**OK**}.

W Skoroszycie zostały wygenerowane dwa dodatkowe arkusze – w jednym znajdują się parametry dopasowania, wykonana statystyka, podsumowanie oraz dodatkowy wykres dopasowania i wykres residual (różnica między wartością modelu i punktem). Na wykresie pojawiła się tabela w której znajduje się równanie dopasowywanego modelu oraz znalezione parametry. W przypadku umieszczania wykresu na raporcie lub sprawozdaniu należy sprawdzić czy wartości z tabeli są możliwe do odczytania – w przeciwnym razie tabelę należy usunąć (na wykresie nigdy nie może znaleźć się nic nieczytelnego).

• Utworzyć nowy arkusz z dwoma kolumnami. Wypełnić je za pomocą komend:

# Col(1) = {1:3:300} Col(2) = -0.5\*Col(1) + grnd()

• Nadać nazwę (Long Name) kolumnie X **Argumenty**, a kolumnie Y nazwę **Zbiór Wartości**. Stworzyć wykres punktowy (scatter) i nazwać go 01Wykres2. Przeprowadzić dopasowywanie liniowe jak w przykładzie powyżej.

• Utworzyć nowy układ strony. Nazwać go 06Uklad. Dodać w lewej części strony wykresy punktowe wraz z dopasowaniem, natomiast po prawej stronie odpowiadające im tabele podsumowywujące (te dodajemy przez {**Add Worksheet...**}), tak jak zademonstrowano na obrazku obok.



# Pamiętaj by ZAPISYWAĆ SWÓJ PROJEKT JAK NAJCZĘŚCIEJ!

# ZADANIE 7 – DOPASOWYWANIE FUNKCJI NIELINIOWYCH

Często się zdarza, że model, którym chcemy dopasować dane jest postaci nieliniowej. W niektórych przypadkach istnieje możliwość obróbki matematycznej zbioru wartości i dziedziny w celu sprowadzenia zależności między nimi do liniowej. Nie zawsze jednak jest to możliwe. W takim wypadku optymalizuje się szukane parametry w celu minimalizacji różnicy pomiędzy wartością modelu w każdym z puntów a wartościami punktów. Najczęściej stosowaną oceną dopasowania jest metoda najmniejszych kwadratów, zdefiniowaną jako:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i, \boldsymbol{\beta}))^2$$

W danym równaniu y<sub>i</sub> jest punktem danych,  $f(x_i,\beta)$  jest wartością funkcji/modelu dla argumentu x<sub>i</sub> przy szukanych parametrach  $\beta$ , i - kolejnym punktem, a n – liczbą punktów w zbiorze danych.

• Utworzyć katalog Zadanie07 w katalogu głownym projektu. Należy w nowoutworzonym katalogu stworzyć Skoroszyt o nazwie 06Skoroszyt, który zawierać będzie cztery arkusze, w każdym dwie kolumny – kolejno o współrzędnych X i Y.

• Przejść do pierwszego arkusza. Otworzyć okienko konsolowe i wpisać następujące linijki:

```
Col(1) = \{1:0.5:20\}
```

```
Col(2) = (62/(6*(Pi/2)^(0.5)))*exp(-2*(Col(1)-10.5)^2/36)+0.1*grnd()
```

• Stworzyć wykres punktowy. Odpowiednio go nazwać. Zaznaczyć punkty na wykresie. Nastepnie w górnym menu wybrać [Analysis -> Fitting -> Nonlinear Curve Fit -> Open Dialog] albo skorzystać ze skrótu **Ctrl+Y**.

Pojawi się okienko dopasowywania nieliniowego. Należy się upewnić, że zaznaczone jest {**Function Selection**} na ustawieniach ("3" na grafice), a następnie wybrać kategorię {**Peak Functions**} ("1" na grafice) i Funkcję "Gauss" ("2" na grafice). Następnie można przejść do zakładki {**Parameters**} ("4" na grafice) gdzie można zdefiniować parametry dopasowywania,

ustawić je jako stałe lub zdefiniować ilość cyfr znaczących. Ustawmy wartość offsetu (y0) na 0 poprzez kliknięcie w kolumnie {**Value**} na odpowiedni wiersz, a następnie ustawmy tą wartość jako stałą (nie będzie podlegać optymalizacji) poprzez kliknięcie na odpowiedni wiersz w kolumnie {**Fixed**}. Ustawmy jeszcze liczbę cyfr znaczących dla wartości area (A)

Dialog Theme ×		► I
Settings Code Parameters Bounds		
Function Selection		
Data Selection	Category Peak Functions	
Advanced	Function Gauss - 2	
Output		
- Supur	Description Area version of Gaussian Function	
	File Name(.FDF) C:\Program Files\OriginLab\Origin85\fitfunc\Ga	uss.fdf
	9 10 7 8	11
	5 10 7 0	
6 5	na 🗟 🖬 💷 🛱 🏟 🏷 🛣 📒	Fit Done Cancel
Residual Formula Sample Curve Messag	es Function File Hints	

poprzez zmianę wartości z kolumnie **{Significant Digits}** z System na 5. W okienku Code możemy zobaczyć opis funkcji (m.in. jej równanie matematyczne, proces początkowej iteracji parametrów oraz ewentualne dalsze obliczenia po dopasowaniu). Równanie matematyczne można również zobaczyć w zakładce **{Formula}** ("6" na grafice). Często się zdarza, że do danej funkcji dołączona jest przykładowy wykres pokazujący ideę poszczególnych parametrów – wykres taki można znaleźć w zakładce **{Sample Curve}** ("5" na grafice). W celu przeprowadzenia jednej iteracji funkcji do punktów wybieramy przycisk **{1 Iteration**} ("7" na grafice), w celu przeprowadzenia iteracji aż do momentu uzyskania optymalnej wartości najmniejszych kwadratów klikamy **{Fit until converged**} ("8" na grafice). W dowolnym momencie możemy powrócić do początkowych parametrów przyciskiem **{Initialize Parameters**} ("9" na grafice, przycisk z P). W każdym momencie możemy wyliczyć wartość najmniejszych kwadratów przyciskiem **{Calculate Chi-Square**} ("10" na grafice). M przypadku wcześniejszego dopasowywania do uzyskania optymalnej wartości przycisk ten zmienia się w **{OK**}, gdyż nie ma co dalej dopasowywać.

Dalsza procedura jest podobna jak w przypadku dopasowywania liniowego – wygenerowane zostają dwa dodatkowe arkusze a na wykresie pojawia się tabela podsumowywująca.

• Przejść do drugiego arkusza. Otworzyć okienko konsolowe i wpisać następujące linijki:

#### Col(1) = {1:0.5:20}

# Col(2)=sin(Col(1)) + 0.1\*grnd()

Stworzyć wykres punktowy. Odpowiednio go nazwać. Zaznaczyć punkty na wykresie. Nastepnie wybrać dopasowywanie nieliniowe i dopasować punkty funkcją sinusoidalną (Category – Origin Basic Function, Function – Sine). Należy ustawić stały offset na 0. • Przejść do trzeciego arkusza. Otworzyć okienko konsolowe i wpisać następujące linijki:

Col(1) = {1:0.5:20} Col(2) = 1+10\*exp(Col(1)/t) + 10\*grnd()

Stworzyć wykres punktowy. Odpowiednio go nazwać. Zaznaczyć punkty na wykresie. Nastepnie wybrać dopasowywanie nieliniowe i dopasować punkty funkcją zaniku wykładniczego (Category – Exponential, Function – ExpDec1).

• Przejść do czwartego arkusza. Otworzyć okienko konsolowe i wpisać następujące linijki:

```
Col(1) = \{-5:0.5:5\}
Col(2) = (2*Col(1)+2)^3 + (4*Col(1)+6)^2 + (6*Col(1)+5)^1 + 100
```

Stworzyć wykres punktowy. Odpowiednio go nazwać. Zaznaczyć punkty na wykresie.

Nastepnie wybrać dopasowywanie nieliniowe i dopasować punkty wielomianem trzeciego stopnia (Category – Polynomial, Function – Cubic). Zauważmy, że w przypadku braku szumu wartość Chi-Square wynosi 0.

• Wykresy należy przedstawić na układzie strony (Layout), tak jak zademonstrowano to na grafice obok. Dodawanie tabel nie jest konieczne.



# ZADANIE 8 – IMPORT DANYCH Z PLIKÓW I PRACA NA WYKRESACH

Należy uruchomić notatnik i napisać w nim	1	2.0
(liczby w wierszu oddzielone są tabulatorem).	2	2
	3	3
Tak stworzony plik należy zapisać jako "Dane.dat" a typ pliku ustawić jako	4	3
"Wszystkie Pliki". Zapisu dokonać na pulpicie.	5	4.5
	6	4
Przewaźnie nie generuje się punktów tylko importuje je z maszyn pomiarowej.	7	5.5
Maszyny te najczęściej zapisują dane w pliku .txt lub pliku .dat. Origin posiada	8	5
Szybką możliwość importowania plików .dat metodą Drag&Drop.	9	6.33
<ul> <li>Utworzyć katalog Zadanie08 w katalogu głownym projektu.</li> </ul>	10	6

• Zmniejszyć rozmiar okna Origin i przeciągnąć z plik "Dane.dat" do okna Origin. Nastąpił import danych z pliku .dat metodą drag&drop. Tak samo można postępować z plikami .txt.

Jest to pierwsza metoda importu danych z plików zewnętrznych. Posiada kilka wad – w przypadku niestandardowego separatora – dane zostaną źle wczytane. W przypadku odwrotnego oznaczania zmiennoprzecinkowości (np. 1.300,10 jako 1 tysiąc trzysta i 10 setnych) – dane zostaną źle wczytane. W przypadku niestandardowych formatów danych – dane nie zostaną wczytane.

Drugą opcją jest wykorzystanie opcji importu. Omówimy opcję 🖀 🛗



123-

**multiple ASCII**}, gdyż jest ona najbardziej uniwersalna. Znajdujemy tą opcję i wciskamy przycisk, pojawia nam się okno importu. Nawigujemy na pulpit i dodajemy plik Dane.dat do kolejki zainportowanych plików. Upewniamy się, że zaznaczona jest opcja {**Show Options Dialog**} byśmy mogli zdefiniować zasady importu.

W oknie opcji mamy możliwość ustalenia kilku ważnych parametrów, które mogą zadecydować o udanym lub nieudanym imporcie. W {**Import Options**} możemy ustalić jaki tryb importowania chcemy stosować (Nowe workbooki, Nowe arkusze w danym workbooku, nowe kolumny, etc.), czy chcemy dodać schematyczny wykres w nagłówku kolumny (tzw. Sparklines) oraz zdefiniować w {**File Structure**}. Czy kolejne kolumny są oddzielone separatorem czy mają może stałą określoną szerokość, jeśli separatorem to co jest tym separatorem (tabulator, spacja, przecinek?) oraz możemy ustalić jakie numeryczne separatory zostały użyte w pliku bądź jaki jest format danych. W napisanym pliku zastosowaliśmy dość standardowy format dlatego wystarczy się upewnić że Separator Numeryczny jest ustawiony poprawnie oraz ustawić {**Import Mode**} na {**Start New Books**} i możemy importować.

• Stworzyć wykres z jednego ze zbiorów punktów zaimportowanych plików.

• Wykorzystując {**Regional Mask Tool**} (opcja "1" na grafice) zaznaczyć co drugi punkt. Maskowanie służy do odrzucania punktów, które nie będą stosowane w dopasowywaniu. Zamaskowany punkt powinien zmienić swoją barwę na czerwoną. Po dokonaniu maskowania należy przeprowadzić dopasowywanie liniowe.

 Maskować można nie tylko na wykresie, ale również w skoroszycie. W skoroszycie zaznaczyć całą kolumnę Y, kliknąć na nią PPM i wybrać opcję [*Mask->Swap*].
 Dokona to zamiany punktów zamaskowanych na jawne, a jawnych na zamaskowane. Wrócić do wykresu i dokonać dopasowania liniowego. Dwie krzywe powinny się znacząco różnić, jak pokazano na wykresie obok.



Jeśli chodzi o opcje przeglądania i analizowania danych na wykresie mamy również szereg innych narzędzi. Po krótce zostanie omówione działanie wybranych. Istnieje możliwość powiększania i zmniejszania wykresów ("2" na pasku narzędzi) – co istotne, osie wykresu biorą poprawkę na zoom in/out. Mamy opcję zaznaczenia dowolnego punktu na polu wykresu ("3") oraz zaznaczenia dokładnie punktu na wykresie ("4") w celu sprawdzenia jego współrzędnych. Istnieje możliwość zaznaczania określonego przedziału punktów ("5"), co przydaje się szczególnie gdy nie chcemy dwa razy korzystać z opcji mask. Mamy także opcję dodawać z paska narzędzi pola tekstowe i różne autokształy ("6"), a także swobodnie poruszać się po wykresie za pomocą tzw opcji {Panning} ("7").

2 9 2 9 3 ╋ ₽3<mark>,</mark> \* 4 5 ta, \* 1 1 Т 6 7 ∕, 1 -

# ZADANIE 9 – NOTATKI I FUNKCJE W ORIGINIE

- Standardowo utworzyć katalog Zadanie09 w katalogu głownym projektu.
- Stworzyć nowy plik notatek 🛛 🕒 🖻 📾 🌇 🔛 👪 🛃 🌽

• Działanie okna notatek jest podobne do programu Notatnik. Można w nim np zanotować rzeczy do przeliczenia, o których chcemy pamiętać następnego dnia. Należy nazwać notatki 09Notatki i wpisać w nich dzisiejszą datę, dzień oraz godzinę.

• Stworzyć nowy plik funkcji 🛛 🖻 🖻 🏙 🏙 🛍 🚨 🍰

Pojawi się okienko Szczegółów Wykresu w którym możemy zdefiniować funkcję, którą chcemy zasymulować oraz jej zakres. W okienku definiowania funkcji napiszmy F1(x)=sin(x)\*cos(x), natomiast u góry odznaczmy {Auto X Range} i zdefiniujmy zakres od 0 do 10. Wciśnijmy OK.

• Możemy zaobserwować wpisaną funkcję we współrzędnych kartezjańskich. W celu obserwacji jej wyglądu w zmiennych biegunowych kliknijmy na {**Polar**}. W celu edytowania obecnej funkcji wystarczy kliknąć PPM na okno i wybrać {**Properties**} a następnie odnaleźć funkcję lub kliknąć funkcję i wybrać opcję {**Plot Details**}.

• Dodajmy nową funkcję F2(x)=0.2\*x. Jest to funkcja liniowa. Przejdźmy do widoku biegunowego. Funkcja liniowa osiągnęła tak duże wartości, że poprzednia funkcja trygonometryczna nie jest już widoczna na wykresie biegunowym, gdyż osiąga za małe wartości. Jest to spowodowane tym, że na wykresie we współrzędnych kartezjańskich zakres X sięga od 0 do 10 podczas gdy na wykresie biegunowym od 0 do 360.

• Dodajmy trzecią funkcję F3(x)=100-x. Zaobserwujmy jak wygląda na wykresie we współrzędnych biegunowych, a jak we współrzędnych kartezjańskich.

• Dodajmy czwartą funkcję. Tym razem kliknijmy na przycisk {**Add**}. Dodajmy rozkład normalny [*Fitting Functions -> Peak Functions -> Gauss*]. Zmieńmy w opisie funkcji wartość y0 na 0, xc na 5, w na 2 i A na 10, następnie kliknijmy OK. Niestety druga i trzecia funkcja przeszkadzają nam w obserwowaniu rozkładu. Kliknijmy PPM na wykres, zaznaczmy {**Properties**}, a następnie na drzewku wykresu po lewej odnajdźmy drugą (F2) i trzecią funkcję (F3) i odznaczmy ją. Zaobserwujmy jak rozkład wygląda na wykresie we współrzędnych biegunowych, a jak we współrzędnych kartezjańskich.

Zwróćmy uwagę że na wykresach biegunowych nie możemy korzystać z opcji Zoom.

Program Origin służy głównie do pracy na danych pomiarowych i dopasowywaniu modeli, więc funkcja ta jest raczej używana dość rzadko, jednak warto mieć świadomość, że istnieje i można ją wykorzystać do obserwowania wyglądu krzywych zaimplementowanych w programie jak i jest przydatna podczas implementacji własnych funkcji nieliniowych.

#### ZADANIE 10\* – MACIERZE W ORIGINIE

#### Przed tym zadaniem KONIECZNIE ZAPISZ SWÓJ PROJEKT!

W przypadku dotarcia do tego zadania zgłoś prowadzącemu by umieścił na FTP plik z danymi "Gauss2D.dat".

Macierze w Originie są wykorzystywane przede wszystkim do umieszczania danych do wykresów których nie da się jawnie zdefiniować w kategorii XYZ. Przykładem takich danych może być płaszczyzna trójwymiarowa albo zwykły obrazek jpg. Obrazek jpg składa się z małych kwadracików zwanych pikselami, z których każdy ma swoje współrzędne na płaszczyźnie 2D, np pixel(2,1) to pixel zademonstrowany na schemacie obok. W przypadku obrazów

czarno-białych piksel jest opisany jedną wartością od 0 do 255 (0 to czarny, 255 to biały), w przypadku obrazów RGB (Red/Green/Blue) opisany jest trzema wartościami od 0 do 255 (0 to czarny, 255 to czysty kolor wiodący).

• Standardowo utworzyć katalog Zadanie10 w katalogu głownym projektu.

Zaimportować plik "Gauss2D.dat" do Origina dowolną metodą.
 Dane zostaną zaimportowane jako skoroszyt. Dane to piksele rysunku --->

Zaznaczyć wszystkie dane w skoroszycie (kliknąć na lewą-górną komórkę) i w menu górnym wybrać [Worksheet->Convert to Matrix->Direct->OpenDialog...]. Zaakceptować ustawienia standardowe.

• Zaznaczyć całą macierz, a następnie wybrać z menu górnego [*Plot->3D Surface->Color Map Surface*]. Wykorzystując pasek narzędzi możemy dowolnie obracać wykres.

• Zaznaczyć płaszczyznę na wykresie a następnie z menu górnego wybrać [*Analysis -> Fitting -> Nonlinear Surface Fit...*]. Dopasować do płaszczyzny "Gauss2D".

• W tym przypadku dopasowana płaszczyzna NIE pojawi się na wykresie, dlatego konieczne jest stworzenie osobnego wykresu z danych które pojawiły się w arkuszu {**FitMatrixCurve1**} w okienku macierzy. Stosujemy ten sam wykres co powyżej.

Zestawić dane na układzie stron (layoucie) zgodnie ze wzorem. W celu dodania wykresów właściwych dla fittowania należy przy dodawaniu wykresu zaznaczyć opcję {Show Embedded Graph}. Tekst dodajemy albo z lewego paska narzędzi albo PPM i opcja {Add Text}.





γ

0 1 2 3 4

0

1

3

4

Χ2

#### ZADANIE 11 – STATYSTYKA NA KOLUMNACH

Oprogramowanie OriginLab może być również wykorzystywane do przeprowadzania statystyki na określonych zbiorach danych. Pozwala na wyliczenie wartości zbiorczych określanych w matematyce jako momenty (czyli liczby punktów, średniej, wariancji, skośności <Skewness – miara asymetrii rozkładu>, współczynnika odchylenia standardowego, kurtozy <Kurtosis – miara spłaszczenia rozkładu>, dolne i górne centyle oraz kilka innych wartości), kwantyle (czyli minimum, maksimum, mediana, pierwszy kwantyl <mediana zakresu danych od minimum do średniej>, trzeci kwantyl <mediana zakresu</p> danych od średnej do maksimum>, zakresu, rozstępu ćwiartkowego (zakres od 1. do 3. kwantyla) i kilku innych) oraz wartości ekstremalne. Opis wraz ze wzorami wszystkich parametrów można znaleźć pod linkiem. Większości z tych parametrów nie używa nikt poza statystykami, ale mimo to dobrze wiedzieć, że gdy będzie konieczne ich wyliczenie to można do tego wykorzystać program Origin.

• Standardowo utworzyć katalog Zadanie11 w katalogu głownym projektu. Należy w nowoutworzonym katalogu stworzyć Skoroszyt o nazwie 11Skoroszyt, który zawierać będzie jeden arkusz z jedną kolumną (obojętne jaki będzie jej typ).

- W kolumnie wpisać 500 wartości grnd().
- Zaznaczyć całą kolumnę, PPM kliknąć i wybrać [Statistics on Columns -> Open Dialog...].

W nowootwartym oknie rozwinąć zakładkę [Quantities to Compute -> Moments].
 Zaznaczyć do wyliczenia wartości N total, średniej arytmetycznej (mean), średniej geometrycznej jeśli jest dostępna (geometric mean), sumy, odchylenia standardowego (standard deviation) oraz wariancji. Przejść do zakładki {Quantiles}. Zaznaczyć do wyliczenia minimum, maksimum, medianę oraz pierwszy i trzeci kwantyl (Q1 i Q3). Przejść do zakładki {Plots} i wybrać wykres pudełkowy (Box Charts). Kliknąć OK. Wykres pudełkowy jest wykresem, gdzie "środek" pudełka jest średnią z wartości, wartości u góry i dołu to

odpowiednio trzeci i pierwszy kwantyl, zakres to wartość odchylenia standardowego. Bliższy punkt jest granicą centyli natomiast dalszy odpowiednio wartością maksimum/minimum.

• Utworzyć nowy układ strony (Layout). Dołączyć do niego wykres pudełkowy. Stworzyć na nim tabelkę, która będzie miała 2 rzędy i 5 kolumn, następnie przepisać 5 pierwszych wartości statystycznych, jak pokazano na rysunku obok.



#### ZADANIE 12\* – IMPLEMENTACJA WŁASNEJ FUNKCJI NIELINIOWEJ

Przy stosowaniu coraz bardziej egzotycznych modeli fizycznych możemy w pewnym momencie stanąć przed sytuacją w której model, który chcemy dopasować, nie istnieje w

bazie modeli programu Origin. Jednak nawet wtedy mamy możliwość zdefiniować nasz model. W ramach tego zadania zaimplementujemy własny model postaci:

# A\*sin(B\*x)\*cos(B\*x)/x

W tym celu zacznijmy standardowo od:

• Utworzenia katalogu Zadanie12 w katalogu głownym projektu.

• Stworzenia okna funkcji a następnie dodanie w nim funkcji opisanej powyższym równianiem (przyjmijmy A=1 i B=1) w celu obserwacji, jak jest jej ewolucja.

• W menu górnym otwórzmy [*Tools -> Fitting Function Organizer*] lub użyjmy skrótu klawiszowego **F9**. W danym oknie mamy możliwość przeglądania wszystkich istniejących funkcji (oraz ich kodu) a także możliwość tworzenia nowych kategorii oraz nowych funkcji.

• Stwórzmy nową kategorię "TI\_Funkcja\_Treningowa" (w przypadku istnienia już tej kategorii – nie musimy jej tworzyć jeszcze raz). Zaznaczyć stworzoną kategorię na drzewku kategorii z lewej części okna. Następnie nacisnąć przycisk {**New Function**}.

• Nazwijmy funkcję inicjałami oraz dniem i godziną rozpoczęcia zajęć (np. przy inicjałach DD i zajęciach w piątek o 15 nazwa to DDPT15). W oknie {**Brief description**} podajemy krótki opis funkcji, np. Funkcja treningowa sin(x)cos(x)/x. W referencjach umieszczamy odnośniki do artykułów, z których stosujemy model, w naszym przypadku nas to nie dotyczy. Typ funkcji zostawiamy jako User-defined. W {**Independent Variables**} umieszczamy symbol elementów dziedziny funkcji (czyli w przypadku funkcji y=f(x) niezależny jest x, ale w przypadku funkcji y=g(t) niezależne jest t, w domyśle chodzi o wartości z których liczona jest funkcja). Z równania modelu do implementacji możemy odczytac jaki symbol ma wartość niezależna. Wartości zależne {**Dependent Variables**} to wartości, które otrzymuje się z funkcji (czyli w przypadku funkcji d=g(c) jest to d), w naszym przypadku pozostańmy na standardowym y. {**Parameters Names**} są symbolami wartości, które będą optymalizowane. W naszym przypadku są to wartości A i B, które wpisujemy po przecinku. Format kodu funkcji {**Function Form**} zostawiamy w Origin C (znanym też jako LabTalk).

• W okienku {Function} definiujemy podstać naszej funkcji. Wpisujemy:

$$y = A*\sin(B*x)*\cos(B*x)/x$$

Następnie, co jest <u>bardzo</u> ważne, by funkcja działała, musi zostać skompilowana. W tym celu klikamy na przycisk obok . Otwiera się okno kodu na którym klikamy przycisk {**Compile**}, a następnie, jeśli kompilacja się powiodła, klikamy na {**Return to Dialog**}. Warto tutaj zaznaczyć, że funkcje nie muszą być napisane w takiej prostej formie jak powyższa, ale można stosować w niej pętle, instrukcje warunkowe i cały zasób jaki oferuje język programowania C. W okienku {Parameter Settings} możemy ustawić jednostki, opis, początkowe wartości oraz granice parametrów A i B zarówno edytując tekst, lub interaktywnie klikając na przycisk obok. Należy ustawić wartości początkowe obu wartości na 1 oraz wpisać im jakiś opis (tzw. meaning).

• W okienku {**Parameter Initialization**} poniżej możemy zdefiniować według jakiego wzoru następuje automatycznia inicjalizacja parametrów (czyli jak wyliczane są wartości parametrów na starcie, np offset jest często inicjalizowany jako minimum z zakresu). W naszym przypadku nie będzie to konieczne. Z ważniejszych jest jeszcze okienko {**Derived Parameters**}, w którym możemy określić dodatkowe zmienne do policzenia. Wpiszmy tam:

• Zapiszmy naszą nową funkcję. Następnie stwórzmy skoroszyt z dwoma kolumnami X i Y. Zdefiniujmy ich wartości wpisując w okienku konsolowym:

Col(1) = {1:1:100} Col(2) = 2\*sin(3\*Col(1))\*cos(3\*Col(1))/Col(1) Zauważmy, że zakładamy A=2 i B=3. Stwórzmy wykres punktowy.

Nowe funkcje możemy również budować przez {**Fitting Function Builder**}, jednak ta opcja jest znacznie mniej skomplikowana i dlatego nie została opisana w tym zadaniu.

#### • Dopasujmy nasz model do punktów pomiarowych (Dokonajmy dopasowania nieliniowego

<u>stworzonej funkcji do danych poprzez okienko</u> <u>dopasowywania nieliniowego Ctrl+Y</u>). **Sprawdźmy, czy otrzymaliśmy założone wartości.** Nie? Dopasowywanie modeli do funkcji do nie jest rzecz zawsze łatwa, często można dopasować różne wartości parametrów, gdyż funkcja ma kilka "lokalnych minimum", w które możemy "wpaść"



podczas dopasowywania. Możemy to sobie wyobrazić a przykładzie grafiki obok. Chcemy, by piłka wpadła do najmniejszego mniejszego dołu, jednak jeśli mamy pecha, może ona przechylić się w lewą stronę stronę i "utknąć" w mniejszym minimum. Dlatego też istnieje kilka różnych ocen dopasowania i kilka różnych metod i algorytmów dopasowywania - Origin wykorzystuje algorytm Levenberga-Marquardta, który jest połączeniem metody skończonych kwadratów i algorytmu Gaussa-Newtona. Oprócz tego mamy jeszcze inne metody dopasowywania, które funkcjonują na zupełnie innych zasadach, takie jak na przykład algorytmy genetyczne (dział sztucznej inteligencji który stara się zaaplikować rozwiązania znane z przyrody do rozwiązywania problemów. Ideą algorytmiki genetycznej jest traktowanie wartości parametrów jako generacji populacji stworzeń, które następnie się krzyżują, a do następnej generacji przechodzi najbardziej "dopasowane" potomstwo, które następnie się krzyżuje i tak dalej) albo symulowane wyżarzanie (bazuje na zjawisku fizycznym stygnięcia rozżarzonego metalu). Jednak zagadnienia te wykraczają daleko ponad zakres tematyczny kursu Technologie Informacyjne.

Zawsze podczas dopasowywania modeli, zwłaszcza zaawansowanych lub niestandardowych, trzeba uważać, by nie wpaść w lokalne minimum, dlatego też tak ważne jest początkowe orientacyjne ustawienie wartości parametrów dopasowywanych bądź dobrze zdefiniowana ich początkowa inicjalizacja.

#### ZADANIE 13 – CAŁKOWANIE I DODAWANIE SERII DO WYKRESU

Całkowanie jest w analizie matematycznej operacją odwrotną do wyznaczania pochodnej. Analityczne wyznaczenia całki nie jest zadaniem trywialnym, ale istnieją możliwości dość łatwego wyznaczania przybliżonej wartości całki oznaczonej. Przykładami takich metod jest

przybliżanie prostokątne, przybliżanie trójkątne czy metody probabilistyczne (np. Monte-Carlo). Ponieważ odwrotność pochodnej jest polem powierzchni funkcji, w celu wyznaczenia całki oznaczonej (od jakiejś wartości a do jakiejś wartości b) przybliża się funkcję (w metodzie prostokątnej) małymi prostokątami jak pokazano na wizualizacji obok (tylko stosuje się znacznie mniejszy krok dx), a następnie wylicza pola powierzchni tych prostokątów i sumuje. W



programie Origin istnieje możliwość łatwego przeliczenia całek w tej sposób. Policzmy więc całkę:

$$\int_0^{2\pi} \sin(x) dx = -\cos(x) \mid_0^{2\pi} = 0$$

W tym celu należy:

• Utworzyć katalogu Zadanie14 w katalogu głownym projektu. Należy w nowoutworzonym katalogu stworzyć Skoroszyt o nazwie 14Skoroszyt, który zawierać będzie cztery arkusze z 2 kolumnami X i Y.

• Uzupełnić kolumnę X wartoścami o 0 do  $2\pi$  z krokiem 0.01. Uzupełnić kolumnę Y jako sinus kolumny X.

• Stworzyć wykres punktowy o nazwie SINUS02PI. Zmniejszyć rozmiar punktów do 3.

• Zaznaczyć w arkuszu kolumnę Y, a następnie wybrać [*Analysis -> Mathematics -> Integrate -> Open Dialog...*].

• Upewniamy się, że mamy zaznaczone {**Result Log Output**}. W tym oknie istnieje też możliwość wybrania typu liczonego pola (matematyczna – czyli wartości ujemne dają ujemne pole, lub bezwzględna – czyli wszystkie wartości dają dodatnie pole). Zostawiamy wyliczenie pola matematycznego.

• Powinna zostać dodana kolejna kolumna z wartościami całki. Dodatkowo powinien pojawić się log w okienku komend, na którym możemy odczytać parametr początku całki (x1) i jej końca (x2) oraz odpowiadające im liczby porządkowe (lub numery wiersza i1 i i2), wyliczone pole (area) oraz wartość maksymalną (y0) i odpowiadającą mu wartość (x0). Jak widać wyznaczony obszar nie jest równy 0, co pokazuje nam niedokładność przybliżenia.

• Dodajmy wartości całki na nasz wykres. W tym celu należy zaznaczyć wykres i wybrać [*Graph->Plot Setup*]. W nowej serii danych także zmniejszyć rozmiar punktów do 3 i ustawić inny kolor.

Na oknie (upewniamy się, że jest on rozwinięty z góry i dołu) należy zaznaczyć layer1, następnie odnaleźć skoroszyt 14Skoroszyt i ustawić w nim "X jako kolumnę X, a jako kolumnę Y wiersz Integrated (upewnić się, że tylko wiersz Integrated jest zaznaczony w kolumnie Y). Na lewym oknie wybrać Scatter i zaznaczyć {Add}.

• Wypadałoby także uaktualnić legendę. W tym celu klikamy legendę PPM i wybieramy {**Update Legend**}.

• W celu sprawdzenia czy faktycznie otrzymaliśmy dobrą funkcję należy dodać kolejną kolumnę o nazwie "Analitycznie" i uzupełnić ją jako –cos() kolumny X. Dodać te punkty na wykres w podobny sposób jak była dodawana całka. Uaktualnić legendę.

Widać wyraźnie, że krzywa ma podobny kształt, ale jest ona większa o jakąś stałą C. I chociaż wynik jest ten sam (w okolicach zera) w obu przypadkach to jednak porównując same krzywe funkcja jest większa o wartość C. Dlatego też przy analitycznym rozwiązywaniu całek oznaczonych dodaje się zawsze stałą C, która w tym przypadku wyniosłaby 1.

• W celu utrwalenia całkowania i dodawania nowych serii do wykresu należy przeliczyć w podobny sposób następujące całki:

$$\int_{0}^{10} x^{2} dx = \frac{x^{3}}{3} |_{0}^{10} = \frac{10^{3}}{3} \approx 333,3$$
$$\int_{-5}^{10} \operatorname{sgn}(x) dx = x \cdot \operatorname{sgn}(x) = 5$$

By użyć funkcji sgn() w Originie należy posłużyć się komendą sign(X). Sgn to funkcja zwracająca wartość znaku, dla wartości ujemnej będzie to -1, dla 0 będzie to 0, dla wartości dodatniej będzie to 1.

#### ZADANIE 14\*\* - PARAMETRYZACJA I PĘTLE FOR W ORIGIN LABTALK

Wstęga Möbiusa jest dwuwymiarową zwartą rozmaitością topologiczną istniejącą w przestrzeni trójwymiarowej. Jej najbardziej osobliwą cechą jest to, że ma tylko jedną stronę (jedną powierzchnię) jak i posiada również tylko jedną krawędź. Wiele osób uważa, że symbol nieskończoności wziął się od postaci wstęgi, lecz jest to niestety nieprawda. Wstęgę Möbiusa można otrzymać sklejając taśmę końcami przy odwróceniu jednego z końców o kąt 180°. Jednak nie po to jest Origin by marnować niepotrzebnie taśmy.

Jednym ze sposobów przedstawienia wstęgi Möbiusa w przestrzeni trójwymiarowej (jako podzbioru R<sup>3</sup>) jest następująca parametryzacja:

$$X(U,V) = \left(1 + \frac{V}{2}\cos\left(\frac{U}{2}\right)\right)\cos(U)$$

$$Y(U,V) = \left(1 + \frac{V}{2}\cos\left(\frac{U}{2}\right)\right)\sin(U)$$

$$Z(U,V) = \frac{V}{2} \sin\left(\frac{U}{2}\right)$$

W tej parametryzacji spełnione są warunki  $0 \le U < 2\pi$  i  $-1 \le V \le 1$ . W celu stworzenia symulacji wstęgi Möbiusa konieczne jest stworzenie najpierw dwóch kolumn parametryzacyjnych. Kolejnym problemem jest to, że musimy dla każdej wartości V przejechać przez cały zakres U, lub na odwót, by mieć pełny zakres wartości parametrów. To nie jest zadanie trywialne i wymaga zastosowania pętli For.

• Utworzyć katalogu Zadanie14 w katalogu głównym projektu. Należy w nowoutworzonym katalogu stworzyć Skoroszyt o nazwie 14Skoroszyt, który zawierać będzie jeden arkusz 5 kolumnami kolejno nazwanymi(i o typach): U(disregard), V(disregard), X(X), Y(Y), Z(Z).

• W języku LabTalk (język skryptowy Origina, bazuje na składni języka C) pętla for ma podobną składnię jak w większości języków programowania:

#### for ( v=2 ; v<10 ; v=v+3 ) { v=v+v; }

definicja warunek iteracja instrukcja

Definicja jest miejscem, gdzie nadaje się wartości początkowej zmiennej, która będzie ulegać zmianie wraz z kolejnością wykonywania pętli. W warunku jest podawany warunek kontynuacji wykonywania pętli, jeśli zależność będzie nieprawdziwa – nie nastąpi kolejna iteracja pętli. W iteracji definiuje się narost bądź spadek zmiennej po wykonaniu pełnej instrukcji. W miejscu instrukcji definiuje się polecenia wykonane dla danej wartości zmiennej. W naszym przypadku mamy dwa parametry U i V, więc konieczne będzie stworzenie istrukcji zagnieżdzonej (pętla for w pętli for). Dodatkowo skorzystamy z komendy "cell(Y,X)", która bezpośrednio uzupełnia komórkę o kolumnie Y i wierszu X. Dodatkowo wprowadzimy zmienną iterowaną niezależnie – licznik – by nie nadpisać na siebie wygenerowanych danych. Pełny kod, który należy umieścić w oknie skryptów a następnie zaznaczyć cały i wcisnąć ENTER wygląda następująco:

W pierwszej pętli generujemy wartości V od -1 do 1 z krokiem 0.1. Następnie dla danej wartości V generujemy wartości U od 0 do  $2\pi$ z krokiem 0.1 i przy każdej generacji U wpisujemy dane do arkusza. Po zakończeniu iteracji U wychodzimy z wewnętrznej pętli i zwiększamy wartość v o 0.1, zaczynając całą instrukcję wraz z wewnętrzną pętlą od nowa.

```
licznik=1;
for (v=-1;v<1;v=v+0.1) {
  for (u=0;u<(2*pi);u=u+0.1) {
    cell(licznik,1)=u;
    cell(licznik,2)=v;
    licznik=licznik+1;
    }
}
```

• Po wyiterowaniu wartości parametrów U i V można wypełnić kolumny X Y i Z zgodnie z powyższymi wzorami. Dane należy następnie przedstawić na "3D Scatter Plot". Pozwoli nam to na podziwianie wstęgi Möbiusa na wykresie. Pozostaje też pytanie czy nie bardziej prostsze nie byłoby po prostu sklejenie dwóch końców taśmy?



Zadania Opracował – mgr inż. Dominik Drabik Screeny i opis na bazie OriginPro 8.5