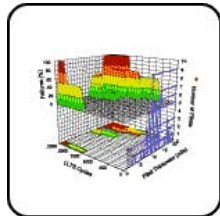
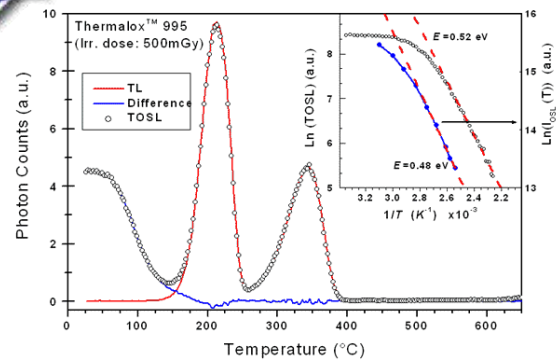
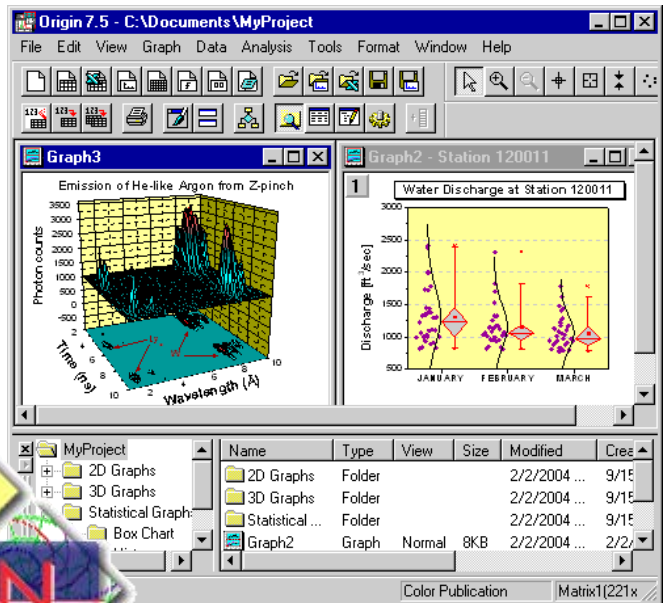
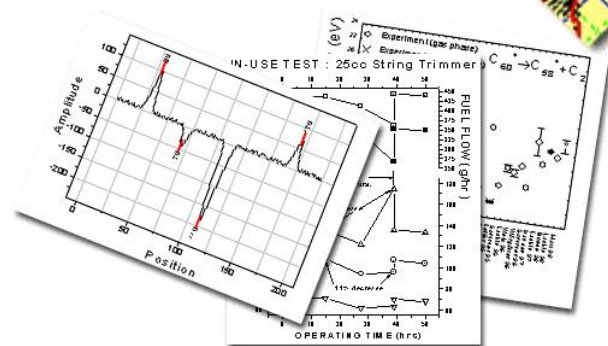
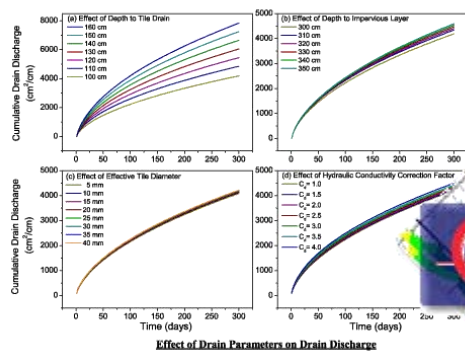


Το πρόγραμμα Origin

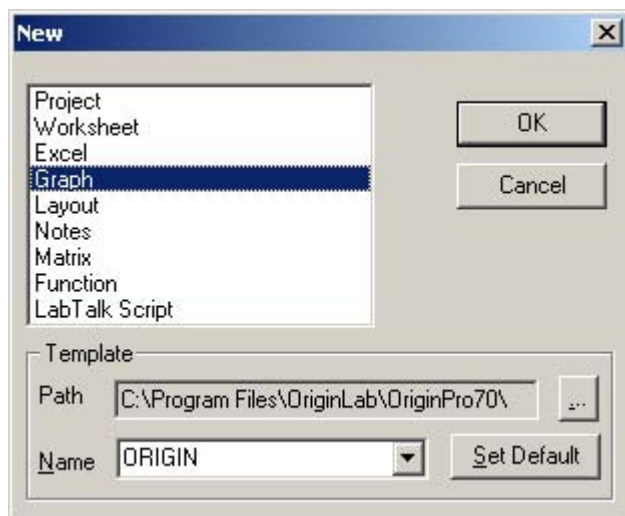


Συνδυασμός
Μαθηματικών
με γραφικές παραστάσεις

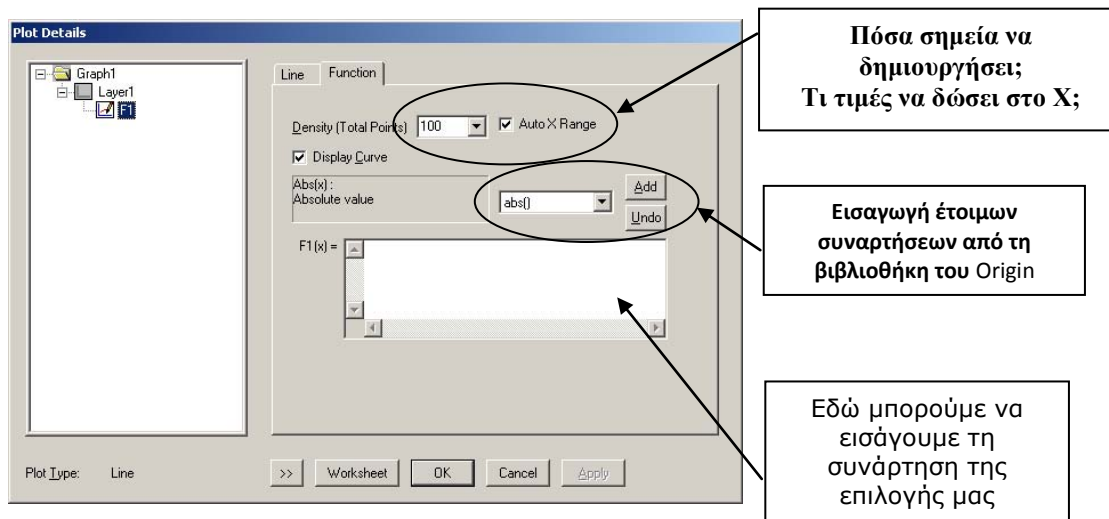


Δημιουργία γραφικής παράστασης συνάρτησης

Για να δημιουργήσετε τη γραφική παράσταση από μια συνάρτηση επιλέξτε **File-New-Graph**



Το Origin δημιουργεί ένα κενό γραφικό παράθυρο και στη συνέχεια επιλέγουμε **Graph-Add Function Graph**



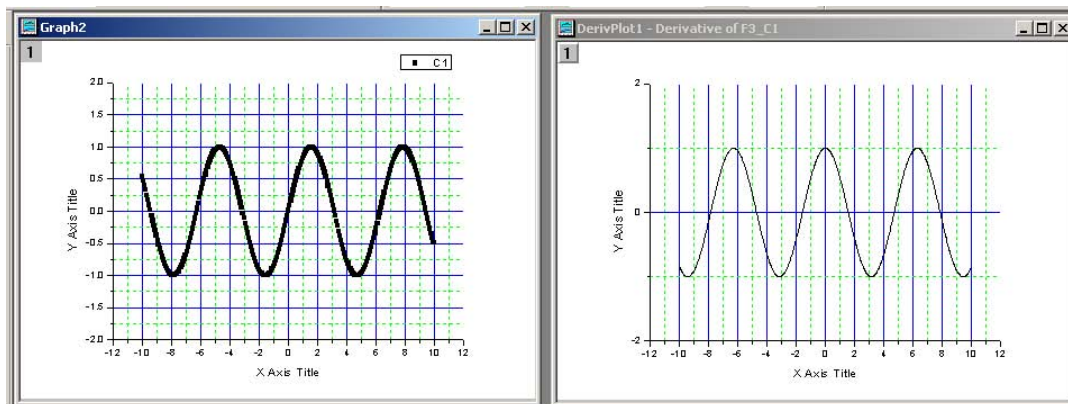
1. Αφού έχετε δημιουργήσει τη γραφική παράσταση της συνάρτησης μπορείτε να δημιουργήσετε και το αντίστοιχο φύλλο εργασίας με τις τιμές της συνάρτησης. Με δεξί click πάνω στη γραφική παράσταση επιλέξτε **Create Worksheet DatasetName**. Το Origin ανοίγει ένα φύλλο εργασίας όπου αποθηκεύει τα Y δεδομένα (τιμές της συνάρτησης). Το όνομα του φύλλου αυτού και του αντίστοιχου σετ δεδομένων καθορίζονται από το όνομα της συνάρτησης όταν δημιουργούσατε το αρχικό γράφημα..
2. Για να δείτε και την αντίστοιχη στήλη με τις δεδομένα εισόδου (X data) ενώ είναι ενεργό το αντίστοιχο φύλλο εργασίας επιλέξτε **View-Show X Column**.

Παραγωγή γραφικής παράστασης

Η συνάρτηση αυτή υπολογίζει την παράγωγο των πειραματικών δεδομένων.

Για να παραγωγίσετε δεδομένα:

1. Επιλέξτε **Analysis: Calculus: Differentiate**. Εμφανίζεται η γραφική παράσταση της παραγώγου (δεξί σχήμα) της συνάρτησης που υπήρχε στην αρχική γραφική παράσταση (αριστερό σχήμα), ενώ παράλληλα το Origin δημιουργεί και το αντίστοιχο φύλλο εργασίας.

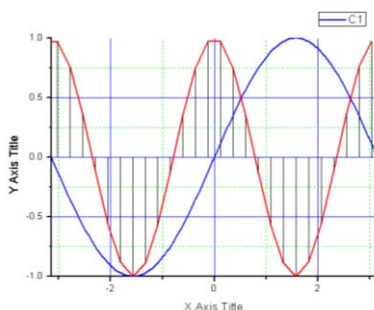
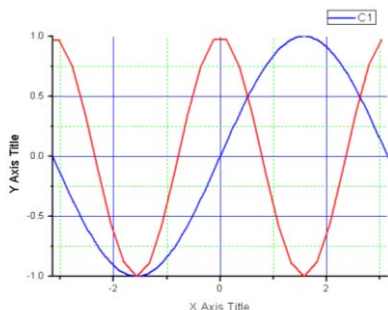


2. Αν υπάρχουν πάνω από μια καμπύλες στη γραφική παράσταση το Origin υπολογίζει την παράγωγο της ενεργής γραφικής παράστασης (με δεξί click πάνω σε οποιοδήποτε σημείο μιας γραφικής καμπύλης και την επιλογή Set as active, μπορώ να επιλέξω την τρέχουσα καμπύλη σαν ενεργή).

Ολοκλήρωση γραφικής παράστασης

Για να ολοκληρώσετε μια γραφική παράσταση:

1. Επιλέξτε **Analysis: Calculus: Integrate**. Εμφανίζεται η ίδια γραφική παράσταση με γραμμοσκιασμένο το εμβαδόν που συμπεριλαμβάνεται στον υπολογισμό του ολοκληρώματος (δεξί σχήμα) της συνάρτησης που υπήρχε στην αρχική γραφική παράσταση (αριστερό σχήμα), ενώ παράλληλα το Origin στο παράθυρο **Results Log** παραθέτει και τα αριθμητικά αποτελέσματα.



18/12/2007 12:15	"/Graph2" (2454452)		
Integration of F4 from zero:			
i = 1	-12	100	
x = -12	-5	12	
Area	Peak at	Width	Height
-0.88777	-1.57576	10.66667	-0.99995
18/12/2007 12:15	"/Graph2" (2454452)		
Integration of F4 from zero:			
i = 1	-12	100	
x = -12	-5	12	
Area	Peak at	Width	Height
-0.88777	-1.57576	10.66667	-0.99995

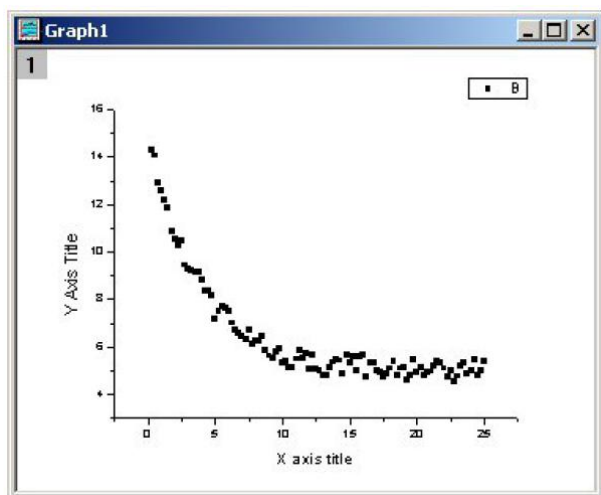
Προσαρμογή μαθηματικών συναρτήσεων σε αριθμητικά δεδομένα

Όταν βρίσκεστε σε ένα γραφικό παράθυρο (graph window), στο μενού **Analysis** είναι ενεργές οι επιλογές για την προσαρμογή των πειραματικών δεδομένων. Η διαδικασία προσαρμογής διεξάγεται αυτόματα από το Origin αφού ο χρήστης επιλέξει τύπο προσαρμογής (από τη παρακάτω λίστα). Το αποτέλεσμα της προσαρμογής είναι μια μαθηματική εξίσωση που συσχετίζει τα δεδομένα μεταξύ τους αλλά εναπόκειται στο χρήστη να ελέγξει την ορθότητα της προσαρμογής και αν η συγκεκριμένη σχέση αντιστοιχεί σε κάποιο φυσικό νόμο κυρίως σε δεδομένα που σχετίζονται μεταξύ τους με κάποιο φυσικό νόμο. Στο παράθυρο Results Log, εμφανίζονται όλα τα αριθμητικά αποτελέσματα που σχετίζονται με την προσαρμογή καθώς και κάποια στατιστικά δεδομένα για την αξιοπιστία της προσαρμογής. Οι δυνατές επιλογές για ΠΡΟΚΑΘΟΡΙΣΜΕΝΗ (γνωρίζετε εκ των προτέρων ότι η σχέση που αναζητάτε είναι κάποιου από τους παρακάτω τύπους) προσαρμογή αριθμητικών δεδομένων με το Origin είναι:

- Linear – Προσαρμογή ευθείας
- Polynomial – Πολυωνμική προσέγγιση)
- Exponential Decay (Εκθετική μείωση $1^{\text{ης}}$, $2^{\text{ης}}$ ή $3^{\text{ης}}$ τάξης)
- Exponential Growth (Εκθετική αύξηση)
- Sigmoidal (Τύπος κατανομής δεδομένων)
- Gaussian (Τύπος κατανομής δεδομένων)
- Lorentzian (Τύπος κατανομής δεδομένων)
- Multi-peaks (Gaussian and Lorentzian) (Τύπος κατανομής δεδομένων)

Υπάρχουν περιπτώσεις όπου τα πειραματικά δεδομένα δεν καλύπτονται από κάποια από τις παραπάνω τυποποιημένες κατηγορίες. Σε αυτή την περίπτωση ο χρήστης μπορεί να ρυθμίσει ανάλογα τις παραμέτρους της προσαρμογής είτε σε κάποια από τις παραπάνω κατηγορίες είτε να δημιουργήσει τις δικές του συναρτήσεις προσαρμογής μέσα από την επιλογή: **Non-linear Curve Fit** του μενού **Analysis**. Η επιλογή αυτή περιέχει πάνω από 150 έτοιμες συναρτήσεις κατηγοροποιημένες ως εξής:

- Origin Basic Functions
- Chromatography
- Exponential
- Growth/Sigmoidal
- Hyperbola
- Logarithm
- Peak Functions
- Pharmacology
- Polynomial
- Power
- Rational
- Spectroscopy
- Waveform



Τα αριθμητικά αποτελέσματα εμφανίζονται και σαν λεζάντα πάνω στη γραφική παράσταση αλλά και στο παράθυρο Results Log. Η εξίσωση της προσαρμογής είναι η:

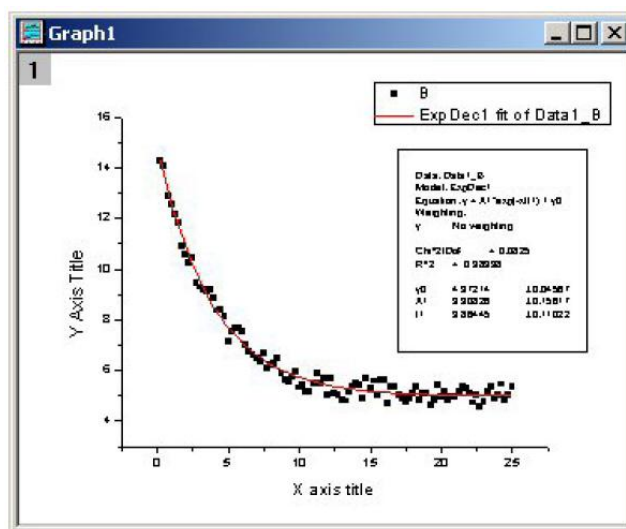
$$y = y_0 + A_1 e^{-(x-x_0)/t_1}$$

ή όπως την καταλαβαίνει το Origin

$$y = y_0 + A_1 * \exp(-(x-x_0)/t_1)$$

όπου x_0 η αρχική τιμή του x η οποία λαμβάνεται ίση με το 0.

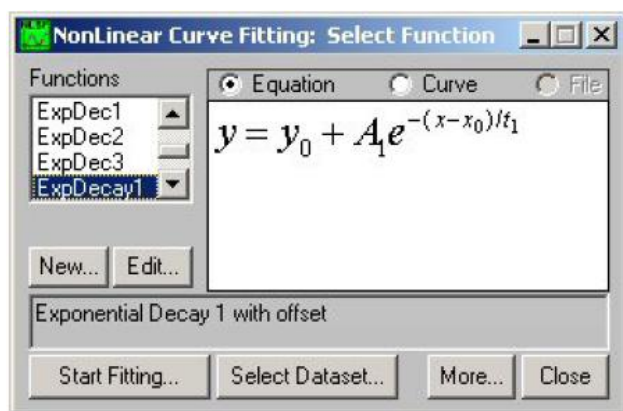
Στο σχήμα αυτό φαίνονται κάποια πειραματικά δεδομένα που ακολουθούν όπως φαίνεται ένα νόμο εκθετικής μείωσης. Για να βρούμε την αντίστοιχη σχέση επιλέγουμε **Fit Exponential Decay First Order** από το μενού **Analysis**. Το Origin θα εκτελέσει όλες τις απαραίτητες διαδικασίες και θα προσαρμόσει μια καμπύλη στα πειραματικά δεδομένα. Το αποτέλεσμα αυτό φαίνεται στο σχήμα που ακολουθεί



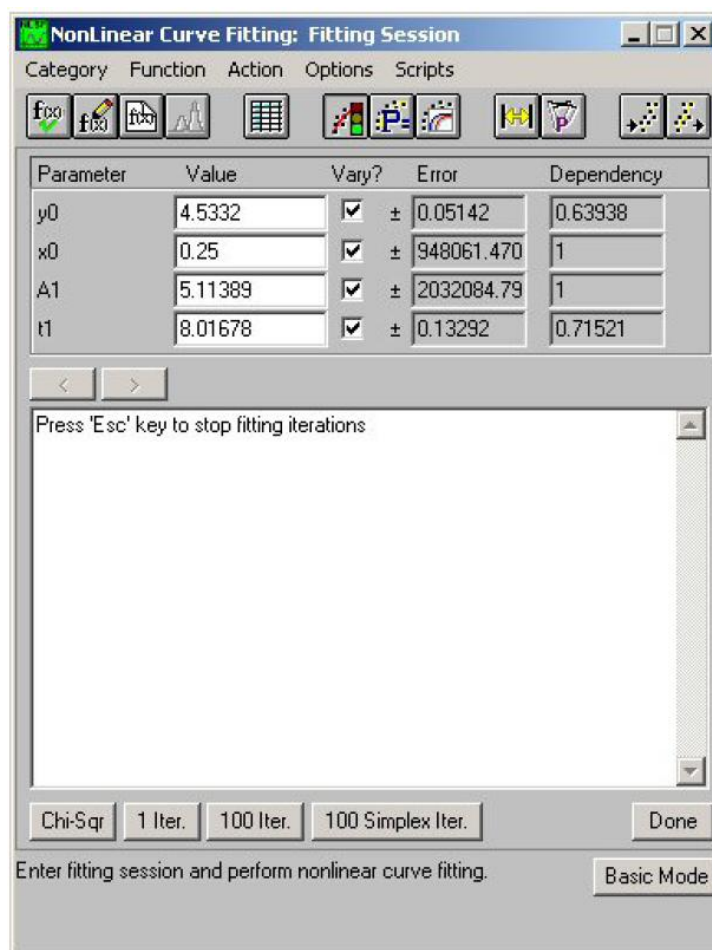
Σε περίπτωση που θέλετε να δώσετε για x_0 τιμή διαφορετική του 0 πρέπει να επιλέξετε **Non-linear Curve Fit > Advanced Fitting Tool** από το μενού **Analysis**.

Με αυτόν τον τρόπο εμφανίζεται το παρακάτω παράθυρο που αντιστοιχεί στο **Basic Mode**. Επιλέξτε **Select Function** και **ExpDecay1** από τη λίστα συναρτήσεων.

Επιλέξτε **Start Fitting, Yes**.

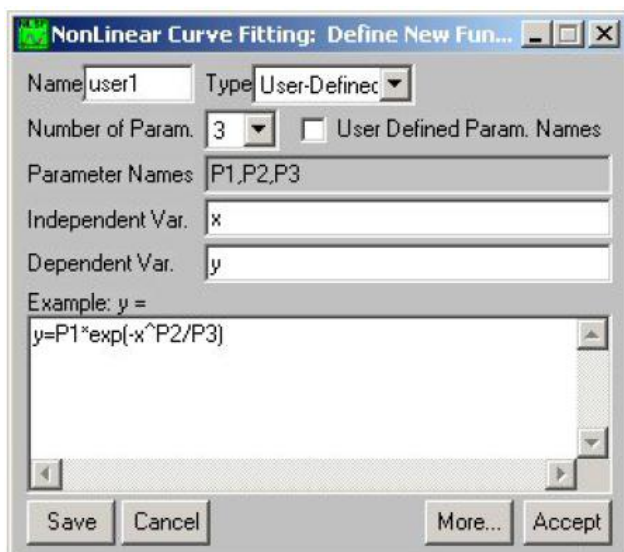


- Εμφανίζεται το παρακάτω παράθυρο όπου σιγουρευτείτε ότι το πλαίσιο **Vary?** για το x_0 είναι ενεργοποιημένο και εισάγετε τις τιμές $y_0=0$, $x_0=0$, $A_1=10$ και $t_1=1$.
- Επιλέξτε το κουμπί **100 Iter.** και στη συνέχεια το κουμπί **Done**.
- Η διαδικασία αυτή θα ενημερώσει τη γραφική παράσταση με τη νέα προσαρμογή και οι νέες παράμετροι θα εμφανιστούν τόσο στη γραφική παράσταση όσο και στο παράθυρο **Results Log**.



Δημιουργία συνάρτησης για προσαρμογή δεδομένων

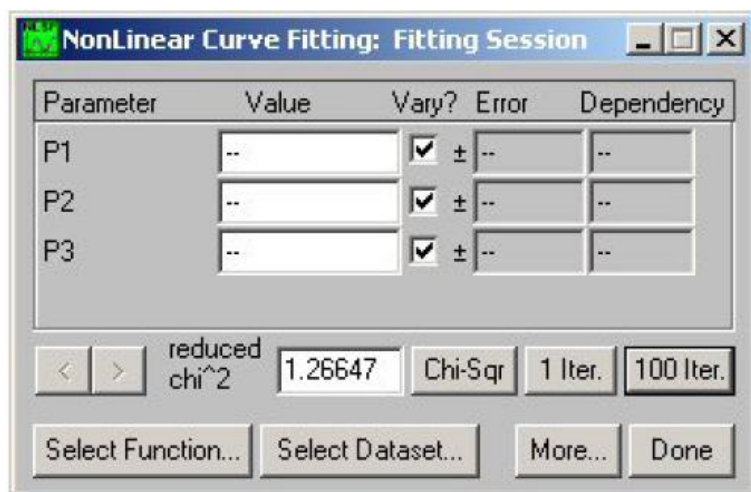
Επιλέξτε **Analysis Non-linear Curve Fit > Advanced Fitting Tool Basic Mode**. Εμφανίζεται το ακόλουθο πλαίσιο διαλόγου:



Επιλέξτε το κουμπί <New> και εισάγετε τον αριθμό 3 στο πλαίσιο **Number of Param.** Στη συνέχεια εισάγετε τον τύπο της συνάρτησης: $y=P1*\exp(-x^{P2}/P3)$ και επιλέξτε <Save> και <Accept>.

Για να ξεκινήσει η διαδικασία προσαρμογής επιλέξτε Start Fitting και πρέπει να επιλέξετε το σωστό σκετ δεδομένων (ενεργό φύλλο εργασίας ή κάποιο άλλο) και στη συνέχεια πρέπει να εισάγετε τις αρχικές τιμές στις παραμέτρους P1, P2, P3 π.χ P1=7, P2=2, P3=2.

Αν θέλετε κάποια από τις παραμέτρους να διατηρεί σταθερή την τιμή της κατά τη διάρκεια της προσαρμογής πρέπει να επιλέξετε το κουτί Vary?



ώστε να μην είναι επιλεγμένο κατά τη διάρκεια της προσαρμογής.

Στη συνέχεια επιλέξτε 1 Iter. ή 100 Iter. ώστε να γίνει η προσαρμογή. Μπορείτε να επαναλάβετε τη διαδικασία μέχρι να έχετε μια ικανοποιητική προσαρμογή.

Μόλις ολοκληρώσετε τη διαδικασία επιλέξτε <Done> για να τερματίσετε τη διαδικασία προσαρμογής και να δείτε το τελικό αποτέλεσμα.

