

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
АСТРАХАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

О.П. Исакова, Ю.Ю. Тарасевич

**Обработка и визуализация данных
физических экспериментов с помощью
пакета Origin**

Астрахань, 2007

ББК

Рецензенты:

Исакова О.П., Тарасевич Ю.Ю. Обработка и визуализация данных физических экспериментов с помощью пакета Origin. Учебно-методическое пособие. – Астрахань, 2007.

В книге рассмотрены.
Предназначено для студентов II курса, обучающихся по направлению «Физика».

ISBN XXXXXXXXXXXXXXXXX

©Исакова О.П., Тарасевич Ю.Ю., 2007

Содержание

Введение.....	4
1. Знакомство с основными возможностями пакета Origin	6
1.1. Таблицы и графики.....	10
1.2. Форматирование графиков	15
1.3. Сложные графики. Слои	22
1.4. Формирование листа отчета	31
2. Функциональные масштабы.....	34
3. Разрыв оси, вставка увеличенного фрагмента графика	40
3.1. Разрывы осей координат	40
3.2. Вставка увеличенных фрагментов графика	43
4. Импорт данных и дифференцирование графиков	45
4.1. Импорт данных	45
4.2. Отображение на графике погрешностей экспериментальных данных	47
4.3. Дифференцирование графиков.....	49
5. Фурье-фильтрация экспериментальных данных	52
6. Аппроксимация нелинейными функциями	57
Упражнение.....	61
Приложение	63
Метод наименьших квадратов.....	63
Фурье-фильтрация	64
Элементарные сведения по теории перколяции.....	66

Введение

Теории приходят и уходят,
а примеры остаются.

И.М.Гельфанд

Настоящее учебно-методическое пособие адресовано в первую очередь студентам-физикам. Однако, мы надеемся, что оно может быть полезно также студентам других естественнонаучных и инженерных специальностей – всем тем, кому по роду своей деятельности приходится иметь дело с анализом и визуализацией экспериментальных данных.

На рынке программных продуктов можно найти множество коммерческих и бесплатно распространяемых программ, позволяющих облегчить трудоемкий процесс обработки данных и их представления в компактном, удобном и наглядном виде. Назовем только некоторые из них: Axum (MathSoft Inc.), SigmaPlot (Systat Software Inc.), SmartDraw, GNUplot. Каждая из этих программ имеет своих более или менее многочисленных поклонников, которые привыкли к используемой программе, научились решать с ее помощью типовые задачи, встречающиеся в их практике, и, естественно, не очень охотно согласятся потратить время и силы для освоения какой-либо иной программы до тех пор, пока не столкнутся с задачей, которая окажется не по зубам привычному пакету. Мир программных продуктов удивительно многообразен, и остается только сожалеть, что многие наши соотечественники в силу различных причин полагают, что Microsoft Office – вершина программистской мысли. Конечно, проводить обработку и визуализацию экспериментальных данных можно и с помощью MS Excel, однако это программа разрабатывалась для решения повседневных офисных задач. Деятельность физика мало схожа с работой клерка – для его задач необходимы программные продукты, создававшиеся совершенно для других целей. Мы не тешим себя надеждой, что наш скромный труд способен поколебать империю Microsoft и обратить значительное число пользователей в иную веру, но надеемся, что он окажется одной из тех капель, которая точит камень.

Изложение материала, как это следует из названия, опирается на пакет Origin. Наш выбор программного продукта во многом субъективен и определен следующими обстоятельствами. Один из соавторов настоящего учебно-методического пособия впервые от коллег-физиков услышал восторженные отзывы о пакете Origin в 1998 году на международной конференции. С тех пор он имел возможность неоднократно убедиться, что пакет Origin широко используется физиками во всем мире. Полистав какой-либо солидный физический журнал, например, Physical Review, специалист, знакомый с пакетом Origin, без труда определит, что многие иллюстрации

создавались именно с помощью этого пакета. Собственный многолетний опыт использования пакета при подготовке научных публикаций позволяет утверждать, что пакет способен облегчить жизнь физика при обработке данных и подготовке иллюстраций в самых сложных случаях.

Особенностью данного учебно-методического пособия является то, что оно целиком опирается на реальные задачи, которые приходилось решать соавторам как в научных исследованиях, так и при проведении занятий. Мы убеждены, что учить нужно на конкретных и осмысленных примерах, которые способны убедить студента в действительной полезности преподносимых ему знаний. Тем самым мы пытаемся восстановить равновесие между классической университетской системой образования, ориентированной на фундаментальные знания, и потребностями реальной жизни, в которой зачастую требуются практические навыки («полезные знания») – быстро устаревающие, но приносящие прибыль здесь и сейчас.

Опыт преподавания пакета Origin на конкретных примерах убеждает нас в том, что при таком подходе студенты с первого же занятия получают стимул изучать пакет, активно применяют его при выполнении лабораторных работ и проведении научных исследований, самостоятельно осваивают дополнительные возможности пакета, обращаются с просьбами подсказать, как можно решить ту или иную возникшую у них задачу. Поскольку все студенты знакомы с MS Excel, они быстро убеждаются в том, что Origin – именно тот инструмент, который создан специально для физиков.

Учебно-методическое пособие, естественно, не охватывает всего круга задач, с которыми может столкнуться физик. Наша задача – убедить студентов в полезности изучения этого пакета и стимулировать их самостоятельно осваивать пакет, сообразуясь со своими конкретными потребностями.

На протяжении всего текста мы старались последовательно закреплять приобретенные знания: часть работы предлагается выполнять самостоятельно, новая информация вводится очень небольшими порциями и опирается на полученные ранее знания. В конце текста приводятся задания для самостоятельной работы, которые должны помочь закрепить изученный материал.

Предполагается, что учебно-методическое пособие будет полезно при изучении дисциплины ЕН.Ф.02 «Общий физический практикум» и темы «Обработка экспериментальных данных» в рамках раздела «Численные методы и математическое моделирование» дисциплины ЕН.Ф.04 «Информатика» студентами направления 510400 «Физика» и других физических направлений и специальностей.

1. Знакомство с основными возможностями пакета Origin

Знакомство с простейшими и наиболее часто используемыми возможностями пакета Origin проведем на примере конкретной лабораторной работы, которую выполняют студенты в рамках физического практикума. По сравнению с оригинальной лабораторной работой приводимый ниже текст сокращен в части краткой теории. Приводимые экспериментальные данные получены на реальной лабораторной установке.

Лабораторная работа: Изучение влияния сопротивления нагрузки на напряжение, мощность, КПД источников тока

Цель работы: исследование влияния нагрузки на нагрузочную характеристику источника тока и режим его работы в электрических цепях. Одновременно в работе определяется ЭДС и внутреннее сопротивление источника тока. Одним из результатов работы является экспериментальное доказательство необходимости согласования нагрузки с источником для получения максимальной мощности.

Оборудование: тестер, мультиметр, магазин сопротивлений.

Краткая теория

Замкнутая электрическая цепь состоит из источников тока и нагрузок. Источником тока называется участок цепи, на котором действуют сторонние силы. Под сторонними силами понимаются любые силы неэлектростатического характера. Участок цепи, на котором сторонних сил нет, называется нагрузкой.

Важнейшими характеристиками источника тока являются его электродвижущая сила (ЭДС – ε) и внутреннее сопротивление r . Электродвижущей силой источника тока называется работа сторонних сил (A_{cm}) по переносу единичного положительного заряда внутри источника тока:

$$\varepsilon = \frac{A_{cm}}{q}. \quad (1.1)$$

Работа электростатических сил по переносу единичного положительного заряда между двумя точками цепи называется разностью потенциалов между этими точками:

$$\varphi_1 - \varphi_2 = \Delta\varphi = \frac{A_{cm}}{q}. \quad (1.2)$$

Полная работа по переносу единичного положительного заряда между двумя точками цепи называется напряжением между этими точками:

$$U = \frac{A}{q}. \quad (1.3)$$

Между U и $\Delta\varphi$ имеется связь, вытекающая из формул (1.1), (1.2) и (1.3)

$$U = \varepsilon - \Delta\varphi. \quad (1.4)$$

Обозначив внутреннее сопротивление источника тока r и подставив закон Ома $U = Ir$ в уравнение связи (1.4), получим для разности потенциалов на выходе источника тока:

$$\Delta\varphi = \varepsilon - Ir. \quad (1.5)$$

Поскольку ЭДС в нагрузке отсутствует, а электрическое поле является потенциальным, то легко получить, что разность потенциалов на выходе источника тока равна падению напряжения на нагрузке ($\Delta\varphi_{\text{ист}} = U_{\text{нагр}}$).

В соответствии с этим выражение (1.5) можно записать

$$U = \varepsilon - Ir, \quad (1.6)$$

где U — падение напряжения на нагрузке.

Зависимость $U(I)$ называется нагрузочной характеристикой источника тока. Как следует из выражения (1.6), построив график $U(I)$, можно найти ε источника тока и его r , по значениям отсекаемых на осях U и I линией нагрузочной характеристики

$$\varepsilon = U_{I=0}, \quad r = \frac{\varepsilon}{I_{U=0}}. \quad (1.7)$$

Из определения мощности как скорости совершения работы $N = \frac{dA}{dt}$, определения ε (1.1) и определения силы тока $I = \frac{dq}{dt}$ можно получить формулу мощности, развиваемую источником ЭДС,

$$N = \varepsilon I. \quad (1.8)$$

Подставив в (1.8) закон Ома для полной цепи $I = \frac{\varepsilon}{R+r}$, получим полную мощность, выделяемую во всей цепи:

$$N = \frac{\varepsilon^2}{R+r}. \quad (1.9)$$

В нагрузке выделяется только часть этой мощности,

$$N_R = UI, \quad (1.10)$$

или

$$N_R = I^2 R, \quad (1.11)$$

или

$$N_R = \frac{\varepsilon^2 R}{(R + r)^2}, \quad (1.12)$$

которая называется полезной мощностью. Максимальная мощность в нагрузке будет выделяться при $R = r$.

Отношение полезной мощности к полной, развиваемой ЭДС в цепи, называется коэффициентом полезного действия (КПД) источником тока:

$$\eta = \frac{N_R}{N}. \quad (1.13)$$

Используя выражение (1.9) и (1.12), можно получить формулу

$$\eta = \frac{R}{R + r}, \quad (1.14)$$

из которой видно, что КПД источника тока зависит от нагрузочного сопротивления R . Согласно формуле (1.14) для случая согласованной нагрузки (т. е. когда $R = r$) $\eta = 0,5$.

Исследуем зависимость полезной мощности и КПД от силы тока. Для этого в выражение для полезной мощности (1.10) необходимо подставить значение напряжения U , используя формулу (1.6). Получим

$$N_R = I(\varepsilon - Ir), \quad (1.15)$$

или

$$N_R = \varepsilon I - I^2 r \quad (1.16)$$

Графически эта зависимость изображается параболой.

Теперь исследуем условие максимума КПД. Подставляя в выражение (1.13) формулы (1.10) и (1.8), получим

$$\eta = \frac{U}{\varepsilon} \quad (1.17)$$

и с учетом (1.6), выражение для КПД примет вид

$$\eta = \frac{\varepsilon - Ir}{\varepsilon} = 1 - \frac{I}{\varepsilon} r. \quad (1.18)$$

Зависимость КПД от силы тока линейная $\eta(I) = 1 - \frac{I}{\varepsilon} r$.

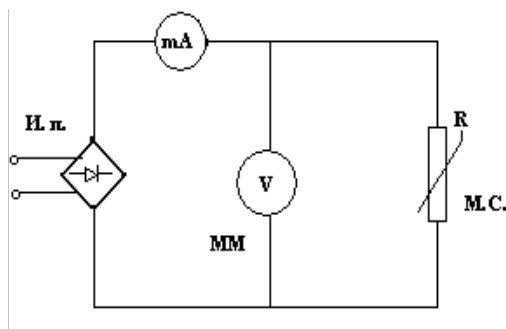


Рис. 1. Схема установки

В данной установке источником постоянной тока является выпрямительное устройство с встроенным сопротивлением. Нагрузкой является переменный резистор R . Ток и напряжение на нагрузке измеряется миллиамперметром и вольтметром соответственно.

Порядок выполнения работы

1. Подключить прибор к источнику питания с напряжением 220 В.
2. Изменяя сопротивление нагрузки от минимального до максимального значения, замеряют соответствующие токи и напряжения на нагрузке.
3. Результаты измерений представить в виде таблицы, в которой должно быть около 10 значений напряжения.

n	U	I	R	N_R	N	η
---	---	---	---	-------	---	--------

4. По данным 3 и 2 колонок таблицы построить график нагрузочной характеристики источника тока $U=U(I)$.
5. Экстраполируя нагрузочную линию до пересечения с осями U и I , находят по формуле (1.7) ε и r источника.
6. Произвести по закону Ома вычисление сопротивления нагрузки.
7. По формуле (10) рассчитать мощность N_R , выделяемую на нагрузке и результаты занести в таблицу.
8. Построить график зависимости мощности в нагрузке N_R , от сопротивления нагрузки $N_R = N_R(R)$.
9. По построенному графику проверить условие получения максимальной нагрузки $R = r$.
10. По формуле (1.8) рассчитать полную мощность N , записав результаты расчета в таблицу.
11. По определению коэффициента полезного действия (1.13) рассчитать КПД источника тока. Все значения η занести в таблицу.
12. Согласно данным в таблице построить график зависимости КПД от сопротивления нагрузки $\eta = \eta(R)$.
13. Согласно данным в таблице построить график зависимости КПД, полной и полезной мощности от силы тока по формулам (1.8), (1.16) и (1.18).

Для обработки и визуализации экспериментальных данных, полученных в ходе выполнения лабораторной работы, воспользуемся пакетом Origin.

1.1. Таблицы и графики

Запустить программу Origin Pro 7, появится окно Data 1 с таблицей для заполнения данными (рис. 1.1). Заполнить таблицу полученными при выполнении эксперимента значениями (рис. 1.2).

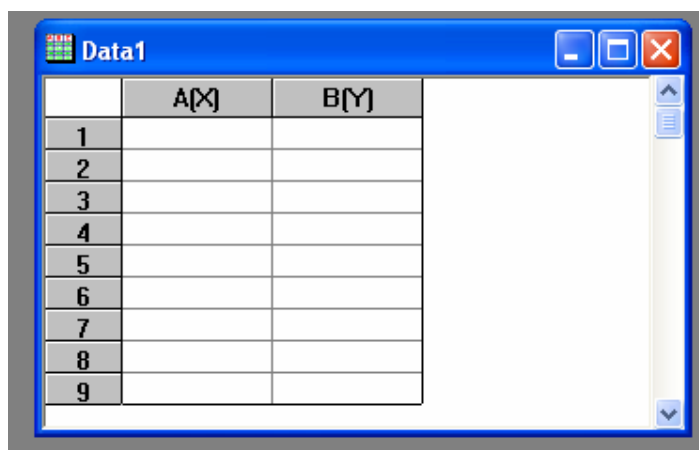
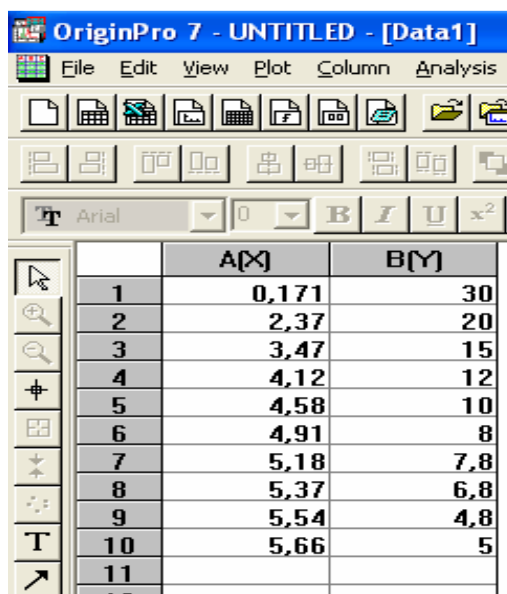


Рис. 1.1. Внешний вид окна с таблицей для данных



The image shows the main window of OriginPro 7, titled 'OriginPro 7 - UNTITLED - [Data1]'. The window has a menu bar (File, Edit, View, Plot, Column, Analysis) and a toolbar. Below the toolbar is a text formatting area with 'Arial' font and '0' size. The main area contains a table with the following data:

	A[X]	B[Y]
1	0,171	30
2	2,37	20
3	3,47	15
4	4,12	12
5	4,58	10
6	4,91	8
7	5,18	7,8
8	5,37	6,8
9	5,54	4,8
10	5,66	5
11		
12		

Рис.1.2 Пример таблицы с экспериментальными данными.

Подписать колонки.

Для этого по заголовку колонки А (заголовок выделен серым цветом) щелкнуть правой кнопкой мыши. В появившемся окне выбрать пункт меню Properties (свойства). Появится диалоговое окно Worksheet Column

Format (рис. 1.3) и в нижнем окне Column Label (подпись колонки) задать подпись U, V, в окне Plot Designation (назначение для графика) указать роль колонки (Y), нажать Next (следующий), аналогично изменить подпись колонки B(I, mA), указать роль (X), нажать OK.

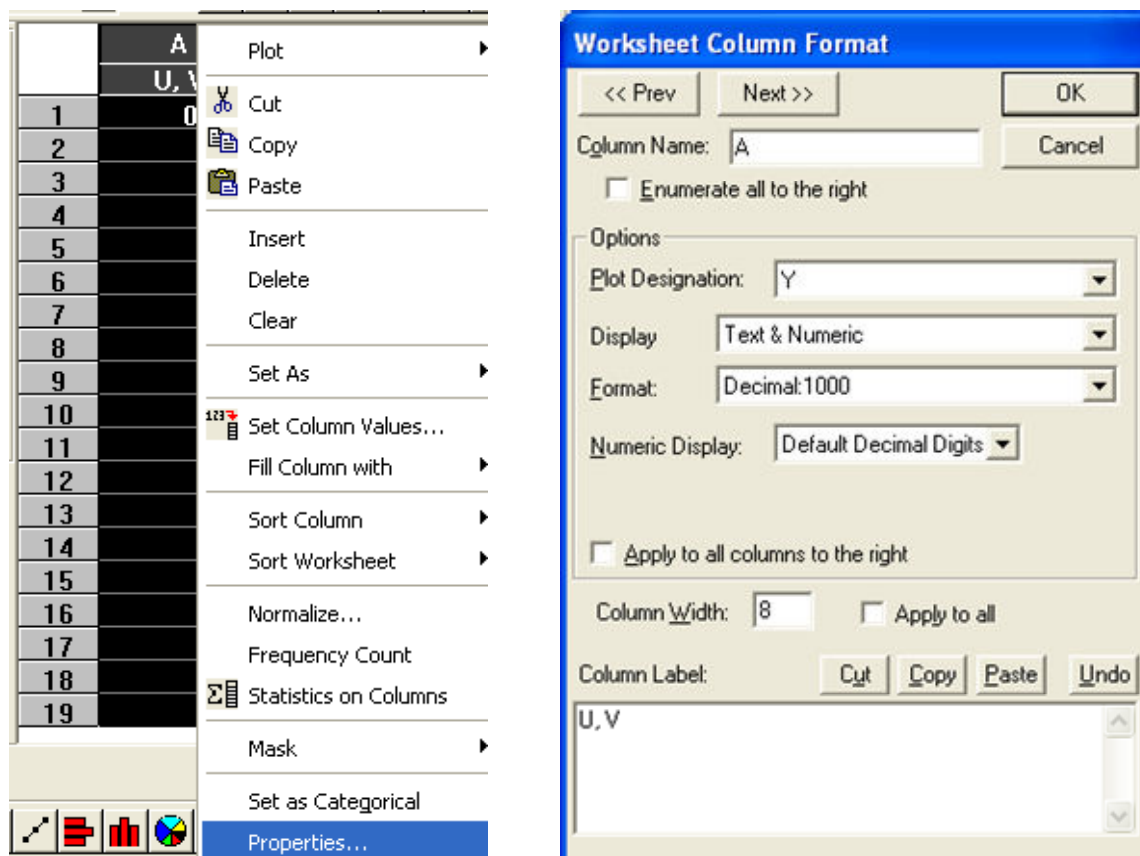


Рис.1.3. Опции настройки свойств колонки

Для построения графика нагрузочной характеристики источника тока $U = U(I)$ необходимо:

- выделить колонки A и B¹;
- в меню Plot (график) выбрать символ Scatter (точки), появится график (рис. 1.4);

¹ Выделение колонок осуществляется либо протаскиванием мыши, либо щелчком мыши с удержанием клавиши Ctrl.

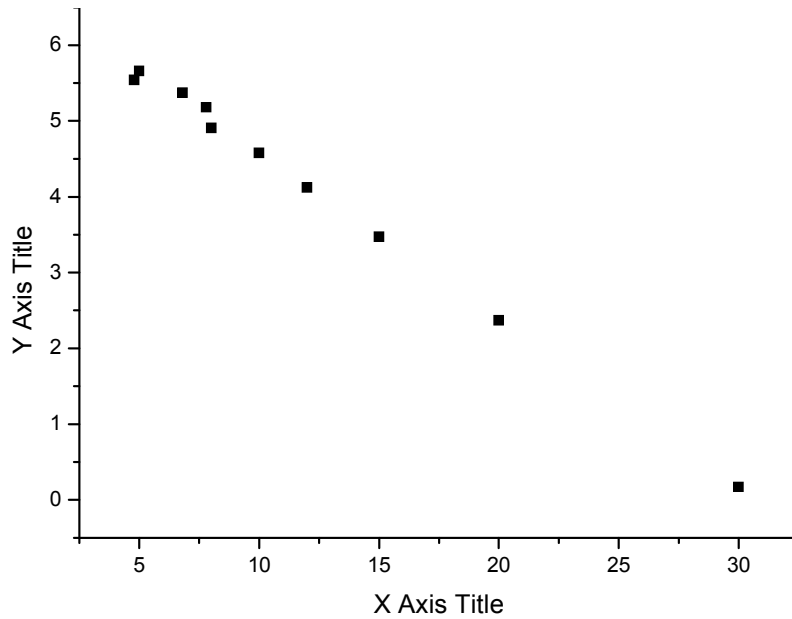


Рис. 1.4. График нагрузочной характеристики источника тока

- щелкнув дважды по одной из точек прямой, вызываем окно **Plot Details** (параметры графика) (рис. 1.5). На закладке **Symbol** (символ) вы можете выбрать внешний вид символов (в данном случае кружки), список которых открывается при нажатии на кнопку **Preview** (предварительный

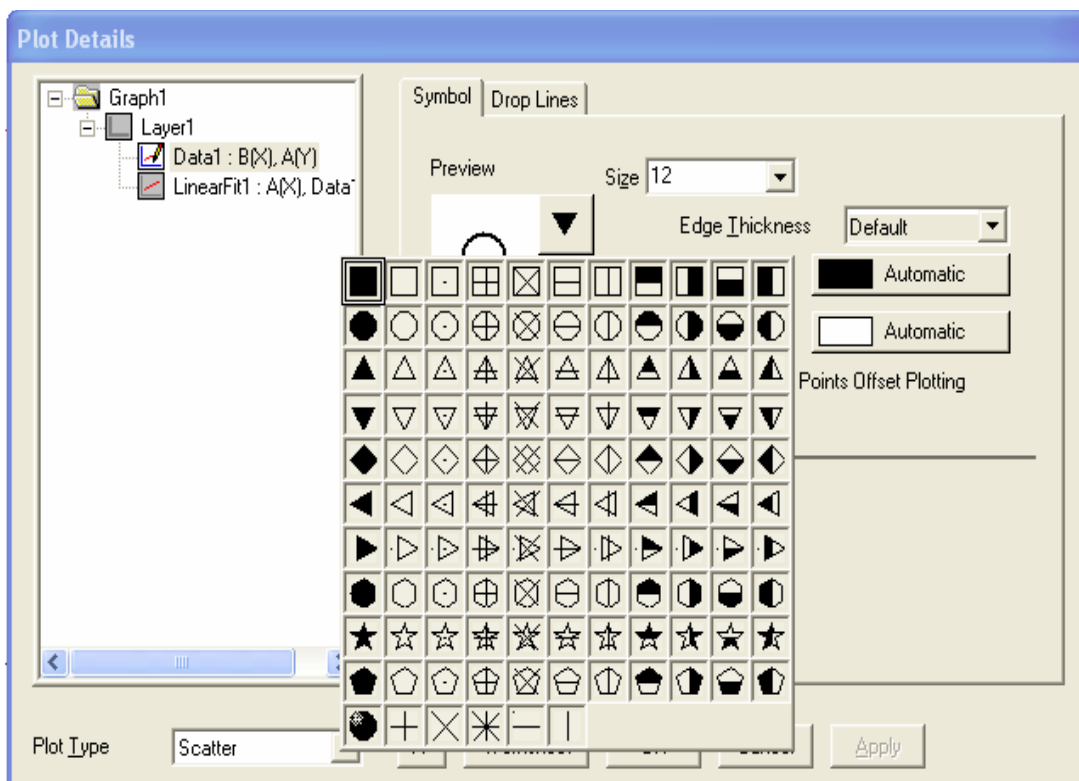


Рис. 1.5. Элементы настройки символов для графика «линия + символ»

просмотр) с черной треугольной стрелкой; указать размер символов в списке **Size** (размер), цвет – в списке **Color** (цвет), толщину линий – в списке **Edge Thickness** (толщина линий).

На закладке **Drop Lines** (линии соединения) вы можете установить переключатели **Horizontal** (горизонтальные) и **Vertical** (вертикальные) (рис. 1.6), и после нажатия на кнопку **OK** появятся линии, соединяющие точки графика с осями. Эти проекции могут облегчить вам сопоставление экспериментальных данных.

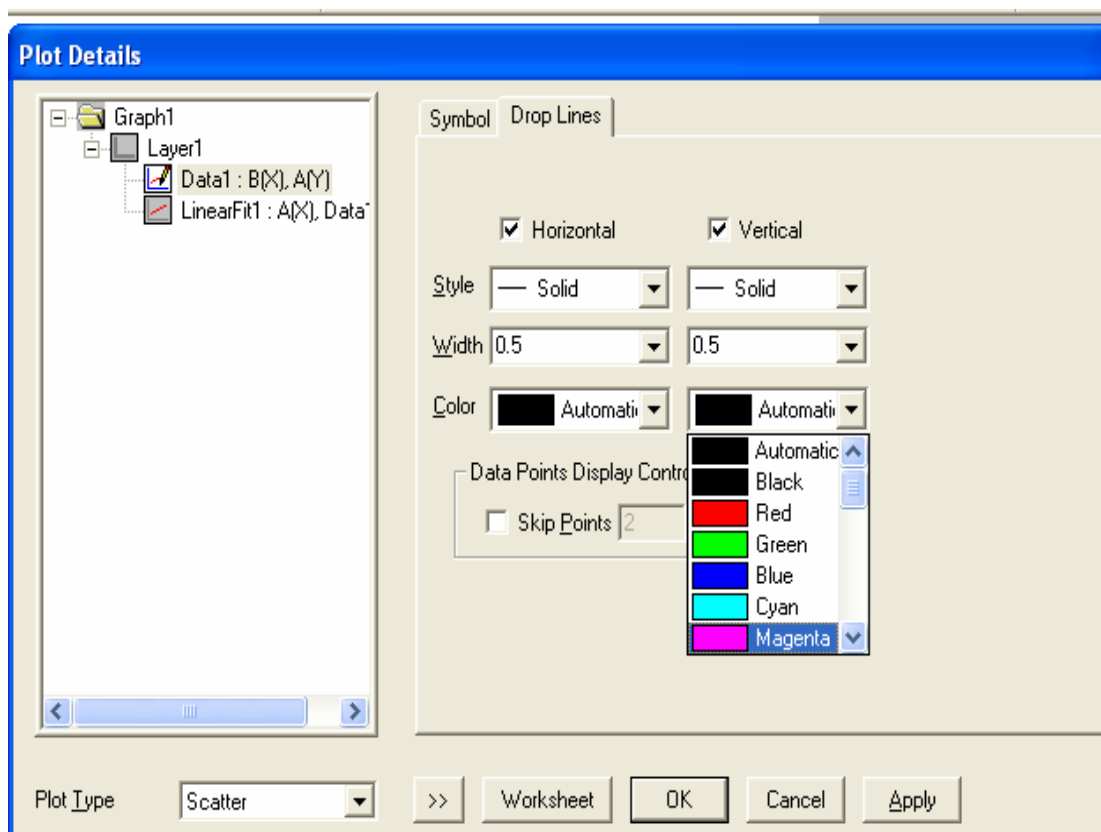


Рис. 1.6. Специфические настройки графика «линия + символ»

- необходимо соединить полученные точки по методу наименьших квадратов. При проведении линейной аппроксимации, нужно чтобы прямая доходила до осей. Для этого в пункте меню **Tools** (инструменты) выберите **Linear Fit** (подбор линии), на закладке **Settings** нужно поставить одну галочку в пункте **Span X Axis** (рис. 1.7).

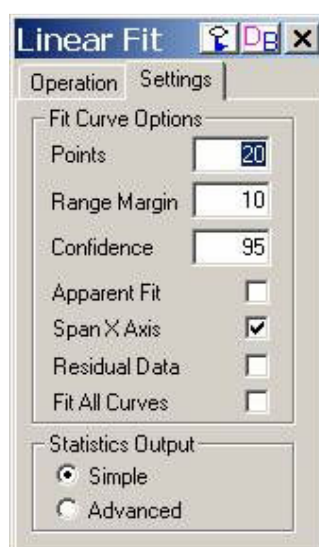


Рис. 1.7. Окно для задания параметров прямой

Затем на закладке **Operation** (операция) нажать кнопку **Fit** (подбор линии), на графике отобразится прямая (рис. 1.8).

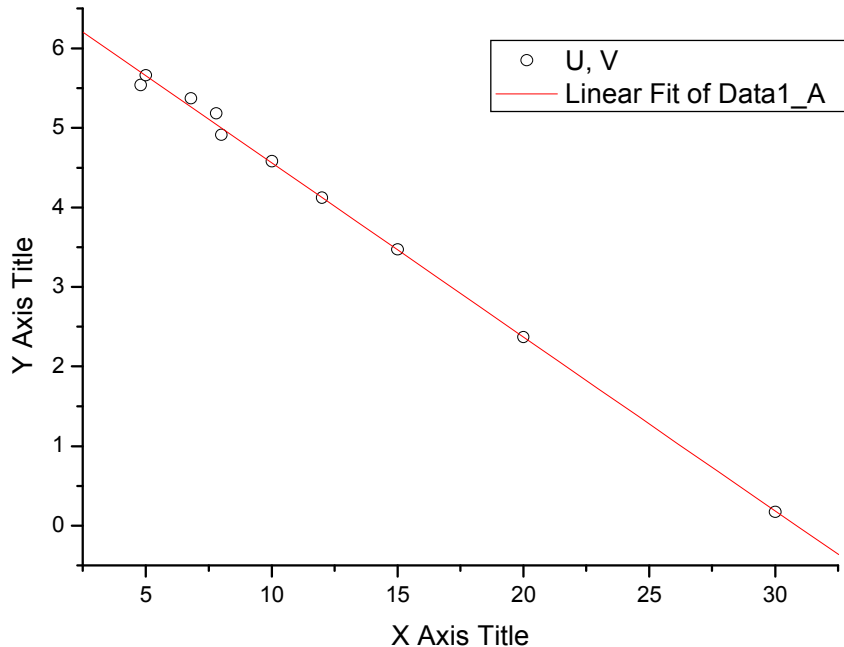


Рис. 1.8. Нагрузочная характеристика

Автоматически в правом нижнем углу окна в протоколе результатов **Results Log** (в случае отсутствия окна, его можно вызвать нажатием комбинации клавиш **Alt+2** или нажатием кнопки **Results Log** (колонка результатов) на стандартной панели инструментов) отображаются значения параметров аппроксимации и их погрешностей.
[15.11.2006 10:10 "/Graph4" (2454054)]

Дата проведения
вычислений

Linear Regression for Data1_A:
 $Y = A + B * X$

Проводится обработка экспериментальных данных по методу наименьших квадратов (линейная регрессия) с использованием уравнения $Y = A + B * X$

Parameter	Value	Error
A	6,74928	0,05336

Получены следующие значения параметров и их погрешно-

B -0,21878 0,00378 сти

R	SD	N	P
-0,99881	0,08976	10	<0.0001

1.2. Форматирование графиков

У каждого графика имеется легенда. Чтобы изменить стандартный текст, необходимо щелкнуть по ней правой кнопкой мыши; в контекстном меню выбрать пункт **Properties** (свойства). Появится окно **Text Control** (управление текстом) (рис. 1.9).

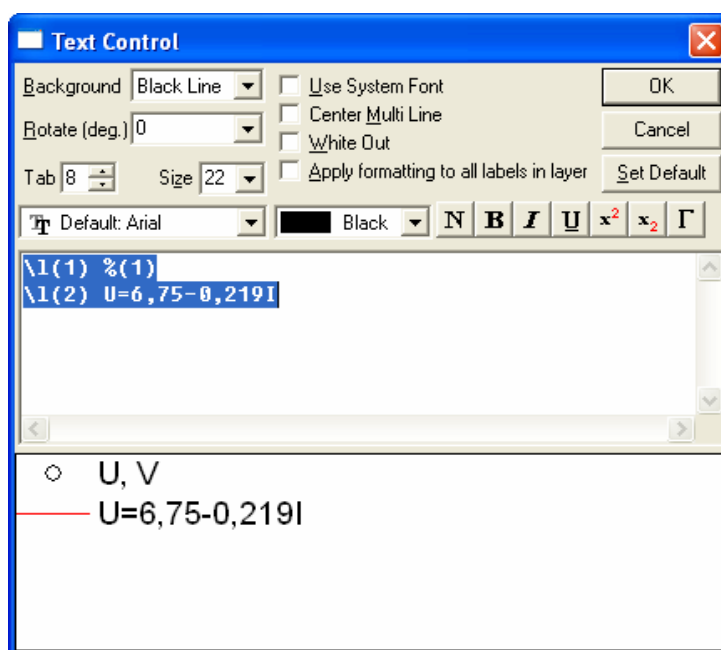


Рис. 1.9. Диалоговое окно для форматирования текста

Ввести названия легенд. Параметры прямой $U=6,75-0,219I$ берутся из протокола результатов. В итоге должен получиться следующий график (рис.1.10):

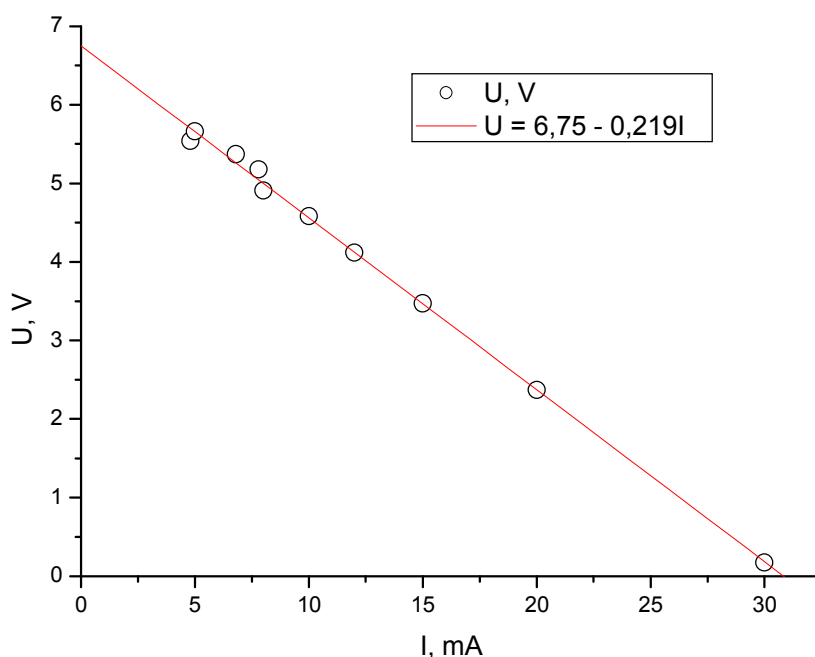


Рис. 1.10. Нагрузочная характеристика

Щелкнув два раза по координатной оси, вызываем диалоговое окно для определения свойств осей (рис. 1.11). На закладке **Scale** (шкала) выбираем ось **Horizontal** (горизонтальный), для которой установим размер отображаемой шкалы в поле **From** (от) (указать начальное значение), а в поле **To** (до) – конечное значение. Количество промежуточных штрихов на оси задаем величиной шага, например, 5, в поле **Increment** (приращение). Нажать **ПРИМЕНИТЬ**. Аналогичные действия проделать с осью **Vertical** (вертикальный), нажать **ОК**.

Переходим на закладку **Title&Format** (заголовок и формат) (рис. 1.12). В списке **Selection** (выделение) выбираем горизонтальную ось, задаем название I , mA в текстовом поле **Title** (заголовок). Нажать **ПРИМЕНИТЬ**. Вертикальную ось называем U , V. Нажать **ОК**.

Переименовать оси можно другим способом, щелкнув правой кнопкой мыши на стандартной подписи к оси, и в появившемся меню выбрать пункт **Properties**. Откроется окно **Text Control** (управление текстом) (рис. 1.13), в котором и задается новая подпись. При этом вы можете выбирать шрифт подписи (лучше использовать шрифт Arial, т.к. все его линии имеют одинаковую толщину), изменить ее цвет, местоположение, начертание шрифта, а также имеется возможность использовать в качестве подписей греческие буквы (кнопка с символом Γ) и т.д.

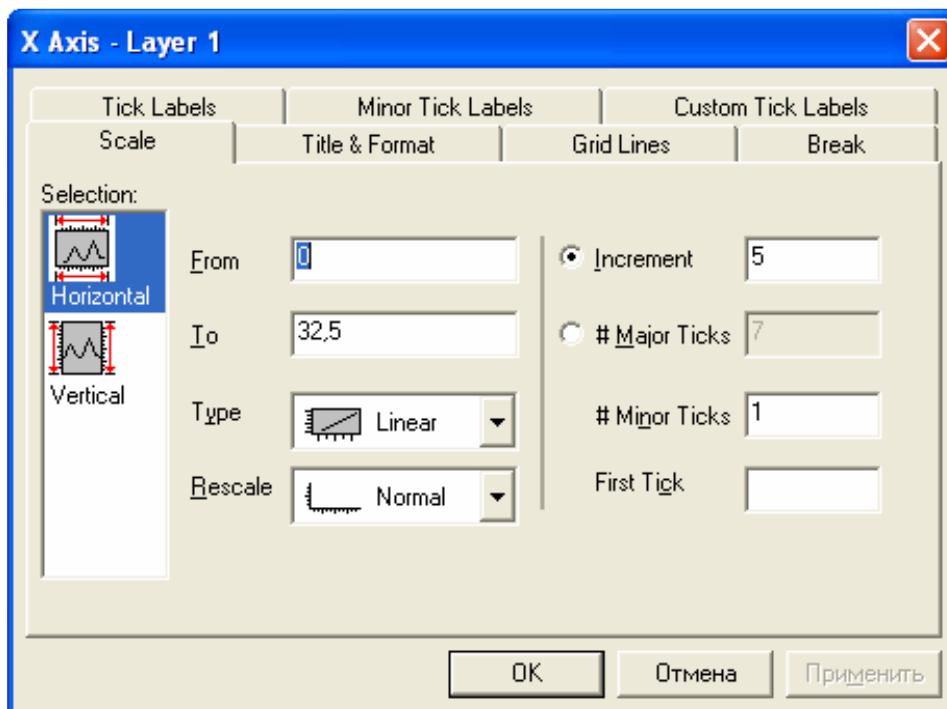


Рис. 1.11. Диалоговое окно для определения свойств осей

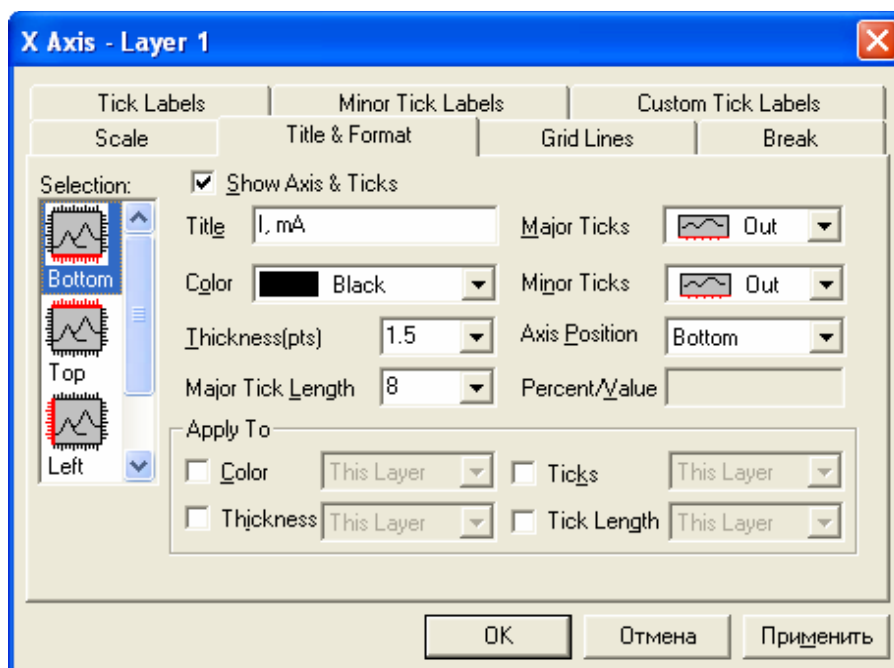


Рис.1.12. На закладке Title&Format определяются графические свойства заголовка оси и формат оси

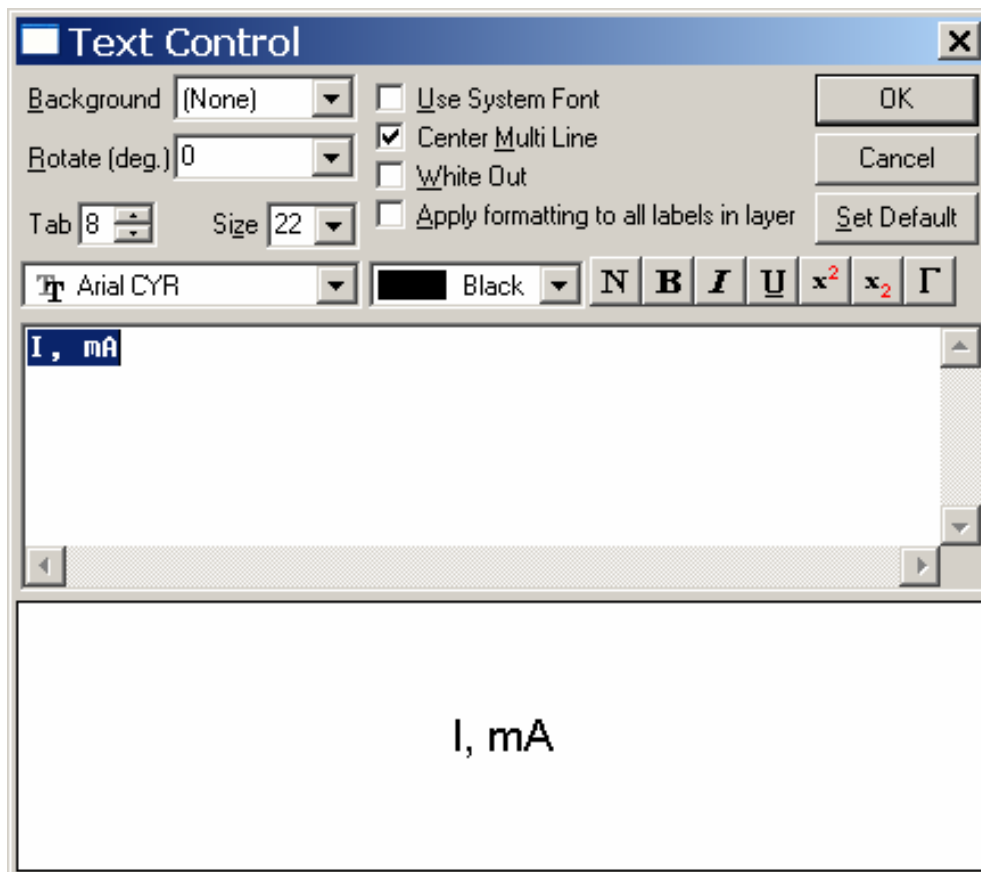


Рис. 1.13. Изменение названия оси

Используя закон Ома

$$U = IR,$$

вычислите сопротивление нагрузки.

Для этого необходимо добавить новую колонку к имеющейся таблице, щелкнув на пустом месте правой кнопкой мыши и выбрав в контекстном меню пункт **Add New Column** (добавить новую колонку). Подписать ее R , кОм. Поскольку искомая величина R является отношением напряжения U (колонка А в таблице) к силе тока I (колонка В в таблице)

$$R = \frac{U}{I},$$

то для заполнения колонки ее необходимо выделить и в контекстном меню выбрать пункт **Set Column Values** (установить значения колонки) (рис. 1.14); в окне $COL(C) =$ записать выражение $COL(A)/COL(B)$, нажать ОК. В том случае, когда для проведения вычислений необходимо использовать какие-либо функции, можно добавить их из имеющего списка кнопкой **Add Function** (добавить функцию).

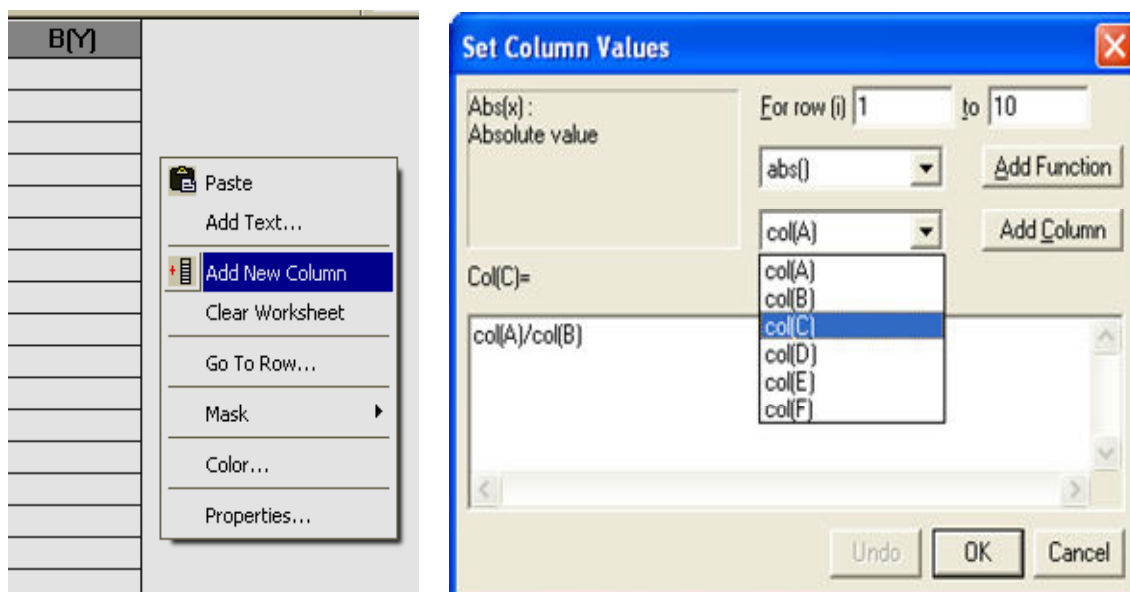


Рис. 1.14. В этом окне вы можете определить выражение для задания значений колонки

Добавить к таблице еще 3 колонки, подписав их соответственно NR, mW, N, mW, КПД. По формуле (1.10) рассчитать мощность, выделяемую на нагрузке, и занести результаты в таблицу, т. е. для заполнения колонки NR в окне COL(D) = записать выражение COL(A)*COL(B), ОК. Рассчитать полную мощность по формуле (1.8). Соответственно COL(E)= COL(B)* ε , где ε – это ЭДС источника, ее значение берется из указанного ранее протокола результатов (параметр A), и по определению коэффициента полезного действия (1.13) рассчитать КПД источника тока, т. е. COL(F)=COL(D)/COL(E). У вас должна получиться следующая таблица (см. Таблицу 1.1).

Таблица 1.1

	B(X1)	A(Y1)	C(X2)	D(Y2)	E(Y2)	F(Y2)
	I, mA	U, V	R, kOm	N R, mW	N, mW	КПД
1	30	0,171	0,0057	5,13	202,5	0,02533
2	20	2,37	0,1185	47,4	135	0,35111
3	15	3,47	0,23133	52,05	101,25	0,51407
4	12	4,12	0,34333	49,44	81	0,61037
5	10	4,58	0,458	45,8	67,5	0,67852
6	8	4,91	0,61375	39,28	54	0,72741
7	7,8	5,18	0,6641	40,404	52,65	0,76741
8	6,8	5,37	0,78971	36,516	45,9	0,79556
9	4,8	5,54	1,15417	26,592	32,4	0,82074
10	5	5,66	1,132	28,3	33,75	0,83852

Построить график зависимости мощности в нагрузке N_R от сопротивления нагрузки $N_R = N_R(R)$ (рис. 1.15), выделив колонки D и C, выбрав в меню Plot (график) пункт Scatter (точки).

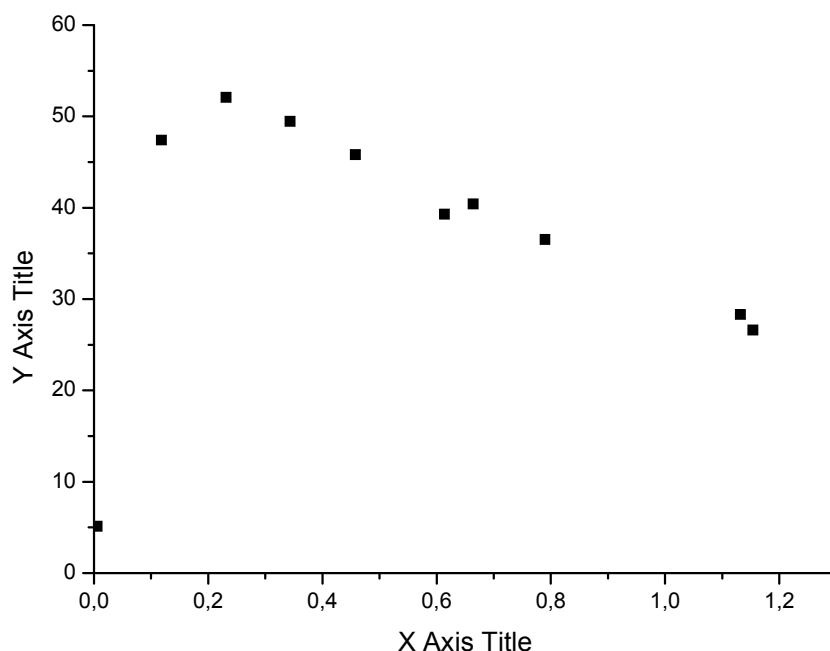


Рис. 1.15. График зависимости мощности в нагрузке N_R от сопротивления нагрузки R

Затем в меню Graph (график) выбрать пункт Add Function Graph (добавить функцию), появится окно Plot Details (параметры графика) (рис. 1.16), в котором необходимо задать функцию, воспользовавшись формулой (1.12) для полезной мощности, где значения ε, r берутся из протокола результатов, а сопротивление R выступает в качестве параметра X. Таким образом, функция должна иметь вид:

$$6.75^2 * X / (X + 0.219)^2$$

Нажать Apply (применить), ОК². Отобразится следующий график (параметры и легенда которого меняются с помощью выше указанных способов) (рис. 1.17).

Таким же методом построить график зависимости КПД от сопротивления нагрузки $\eta = \eta(R)$, выделив колонки F и C и используя формулу (1.14), задать вид функции:

$$X / (X + 0.219).$$

² Достаточно нажимать только ОК. Кнопка Apply дает возможность увидеть результат и внести какие-то изменения, если результат нас не удовлетворил.

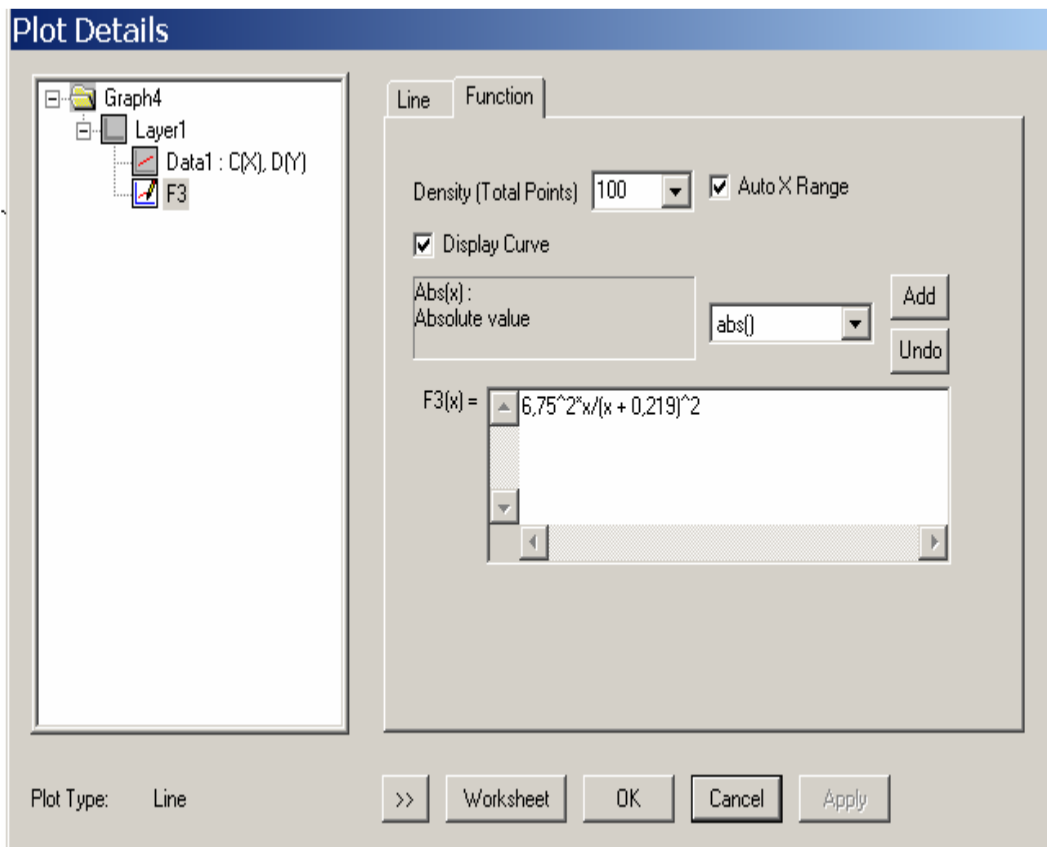


Рис. 1.16. Окно, позволяющее задать вид отображаемой функции

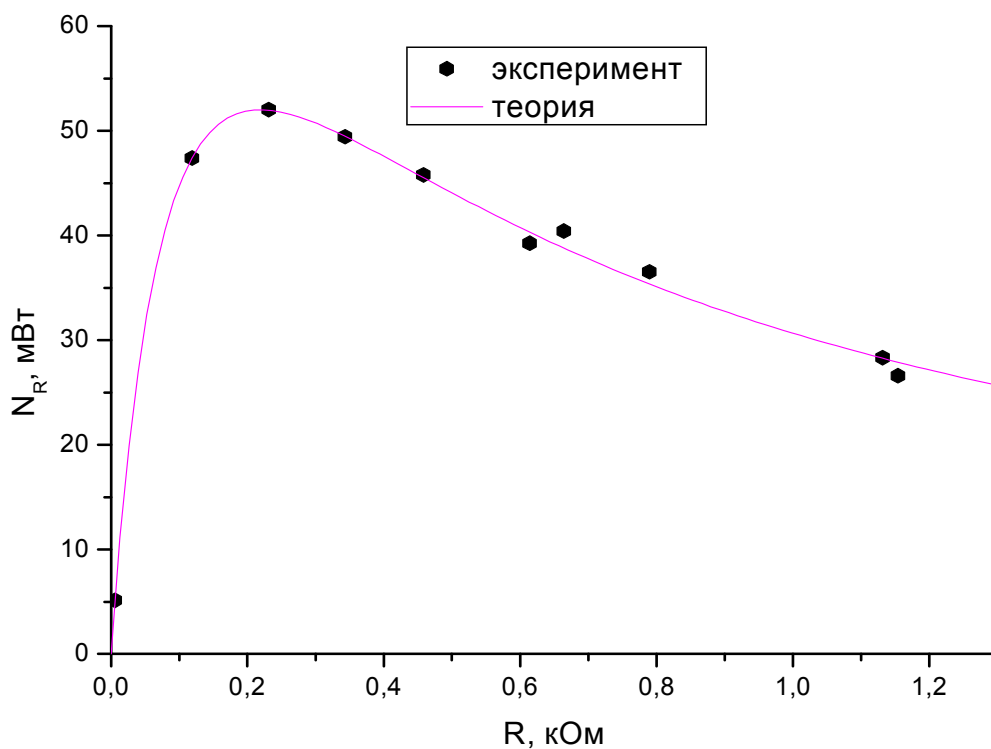


Рис. 1.17. Зависимость полезной мощности от сопротивления

Соответствующим образом изменить параметры графика и его легенду (рис. 1.18).

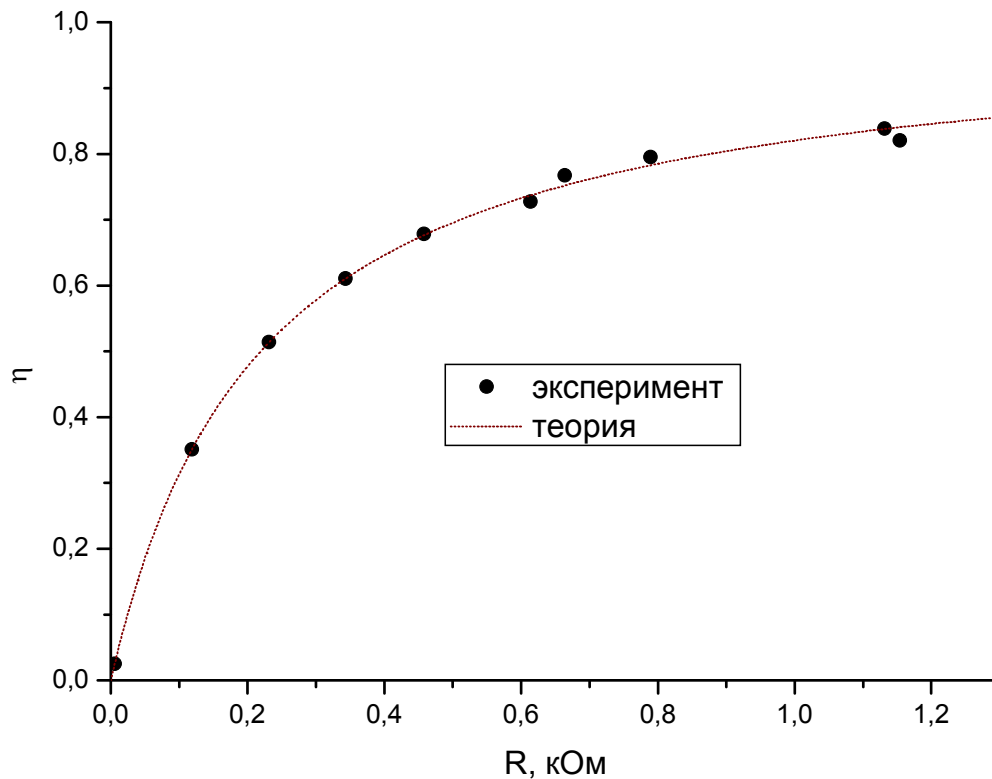


Рис. 1.18. Зависимость КПД источника от сопротивления

1.3. Сложные графики. Слои

Необходимо изобразить зависимости мощности и КПД от силы тока $N = N(I)$ и $\eta = \eta(I)$.

Пакет Origin позволяет в пределах одних координатных осей создавать и размещать множество графиков. Для отображения кривой $N = N(I)$ (рис. 1.19) в таблице выделите колонки E и B, постройте график указанным выше способом, и воспользовавшись формулой (1.8), задайте вид функции $6.75 * X$.

Теперь на этих же осях нужно отобразить кривую полезной мощности $N_R = N_R(I)$.

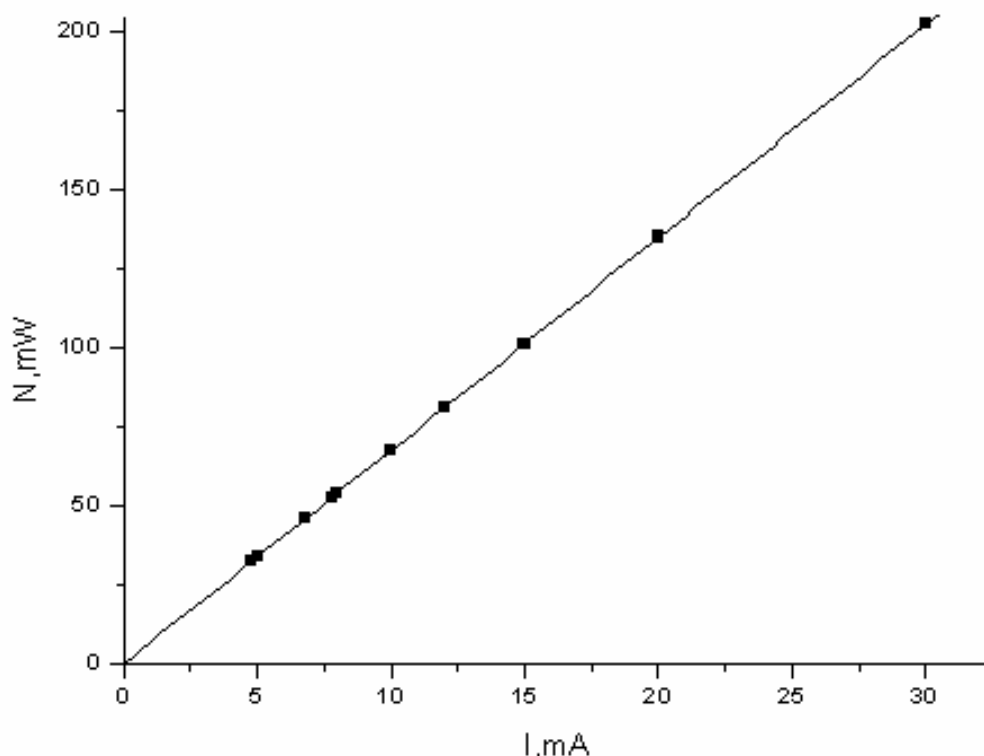


Рис.1.19. График зависимости мощности от силы тока

Как известно, для построения графика необходимы по крайней мере три элемента: координатные оси, набор данных (их может быть несколько) и графические метки (легенды). Origin объединяет эти три элемента в одном значительном объекте, называемом слоем. Слои добавляются на график по следующим причинам:

- нужно отобразить один и тот же график, но в разных координатных осях;
- необходимо создать и разместить множество графиков в пределах одного окна;
- требуется вставить график (или фрагмент графика) в пределах этого же графика.

Слой является фундаментальным блоком для графиков в Origin. Создавая графики, вы можете устанавливать вплоть до 50 слоев на одной странице, при этом слои могут быть независимыми друг от друга. Выполнение каких-либо действий (построение графика, добавление текста и др.) всегда производится в активном слое, и в данный момент времени может быть активным только один слой. В пакете Origin каждый слой имеет связанную иконку слоя в верхнем левом углу окна графика. Иконка появляется как небольшой серый прямоугольник, содержащий номер слоя. Иконки Слоя сообщают Вам какой слой является активным. Когда слой активен, иконка слоя «вдавлена». Для построения графика полезной мощности на

иконке слоя 1 необходимо щелкнуть правой кнопкой мыши, появится под-меню, в котором нужно выбрать пункт Plot Associations (рис.1.20).

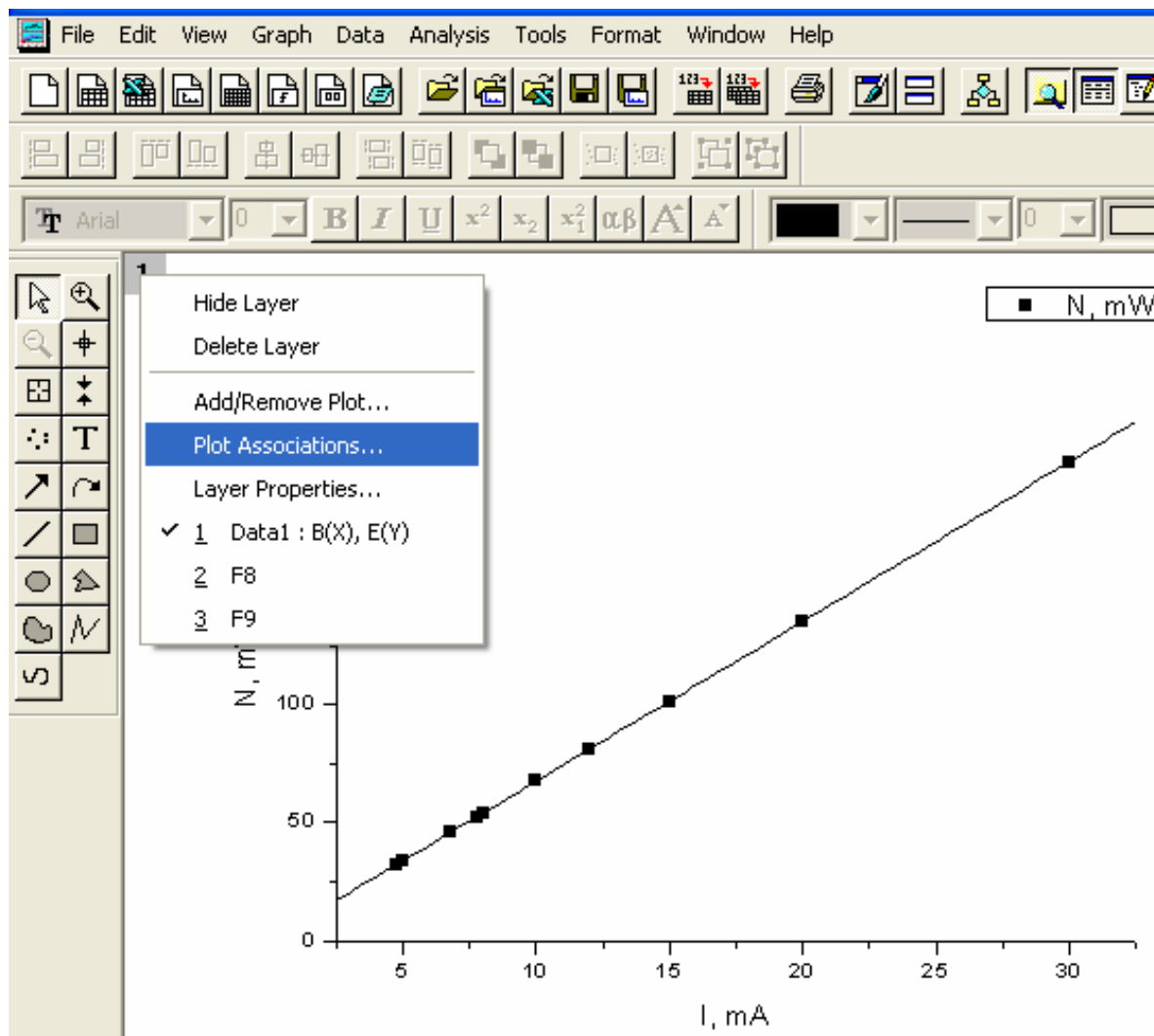


Рис.1.20. Добавление нового слоя на график

В появившемся окне **Select Columns for Plotting** из предлагаемого списка выбрать **Data1**. Среди перечисленных колонок таблицы следует выбрать лишь те, которые понадобятся для построения кривой, в данном случае это колонки B и D. Роль колонок (B(X), D(Y)) задается в столбце **Column** (столбец). После этого нажать кнопки **Add** (добавить) и **OK** (рис.1.21 а, б).

На графике отобразятся точки. Затем в ранее упомянутом пункте **Add Function Graph** (добавить функцию) необходимо, воспользовавшись формулой (1.16), задать вид функции

$$6.75x - 0.219x^2.$$

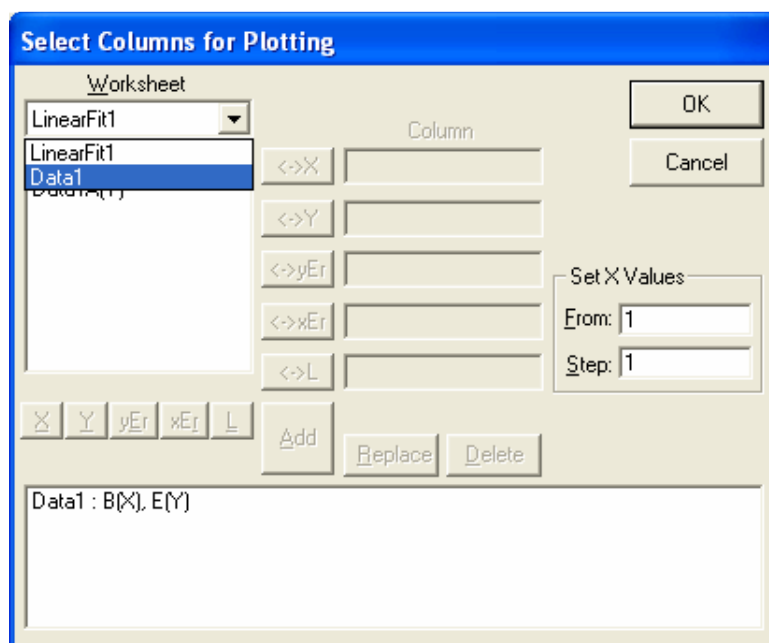


Рис.1.21а. В этом окне можно назначить роль каждому столбцу таблицы данных в создаваемом графике

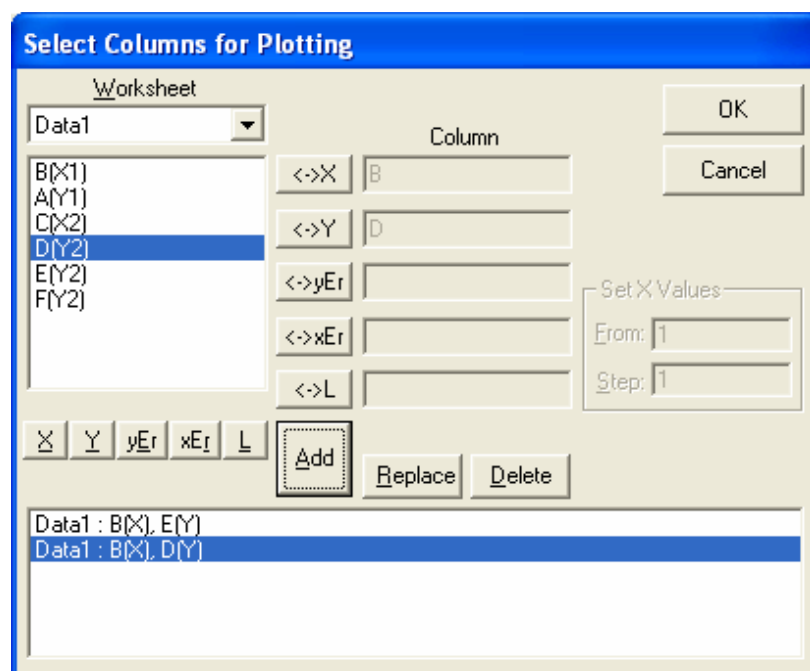


Рис. 1.21б. Новый набор данных создан

Появится график зависимости полезной мощности от силы тока (рис. 1.22).

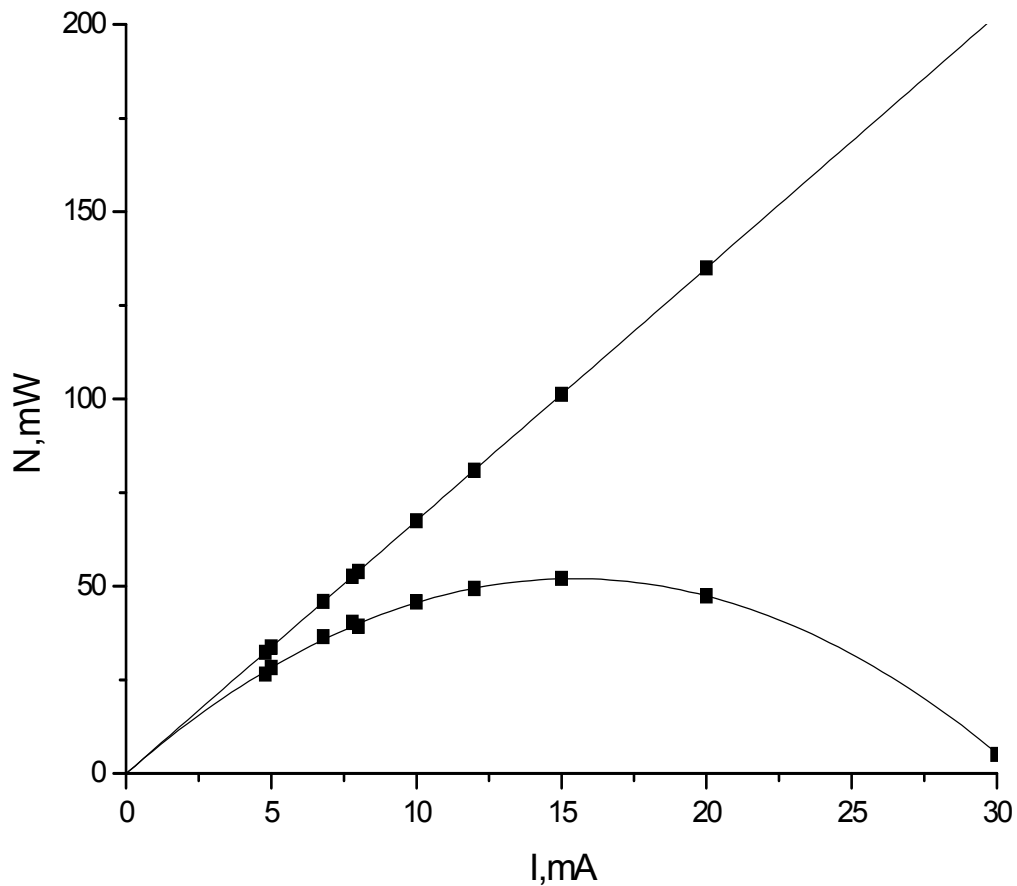


Рис. 1.22. график зависимости полезной мощности от тока

Так как требуется изобразить на этом же графике зависимость КПД от силы тока, то нам необходимо добавить новый слой, на котором будет отображена еще одна вертикальная ось справа. Для этого в меню **Tools** (сервис) выбрать пункт **Layer** (слой), который позволяет добавить необходимую нам координатную ось (рис. 1.23).

В том случае, когда на одном графике необходимо изобразить зависимости двух различных физических величин, которые имеют разные размерности или изменяются в разных диапазонах, в физике часто применяют графики с двумя осями ординат.

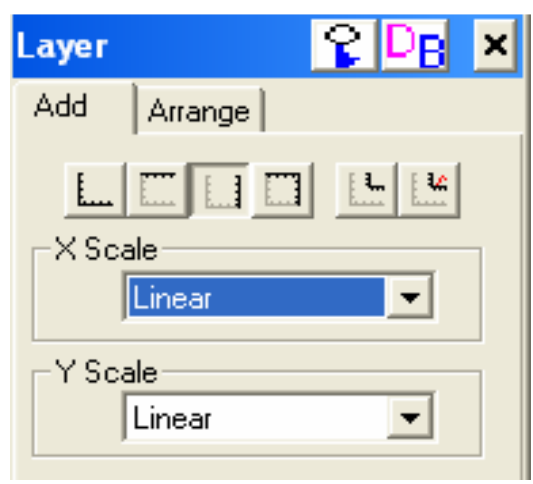
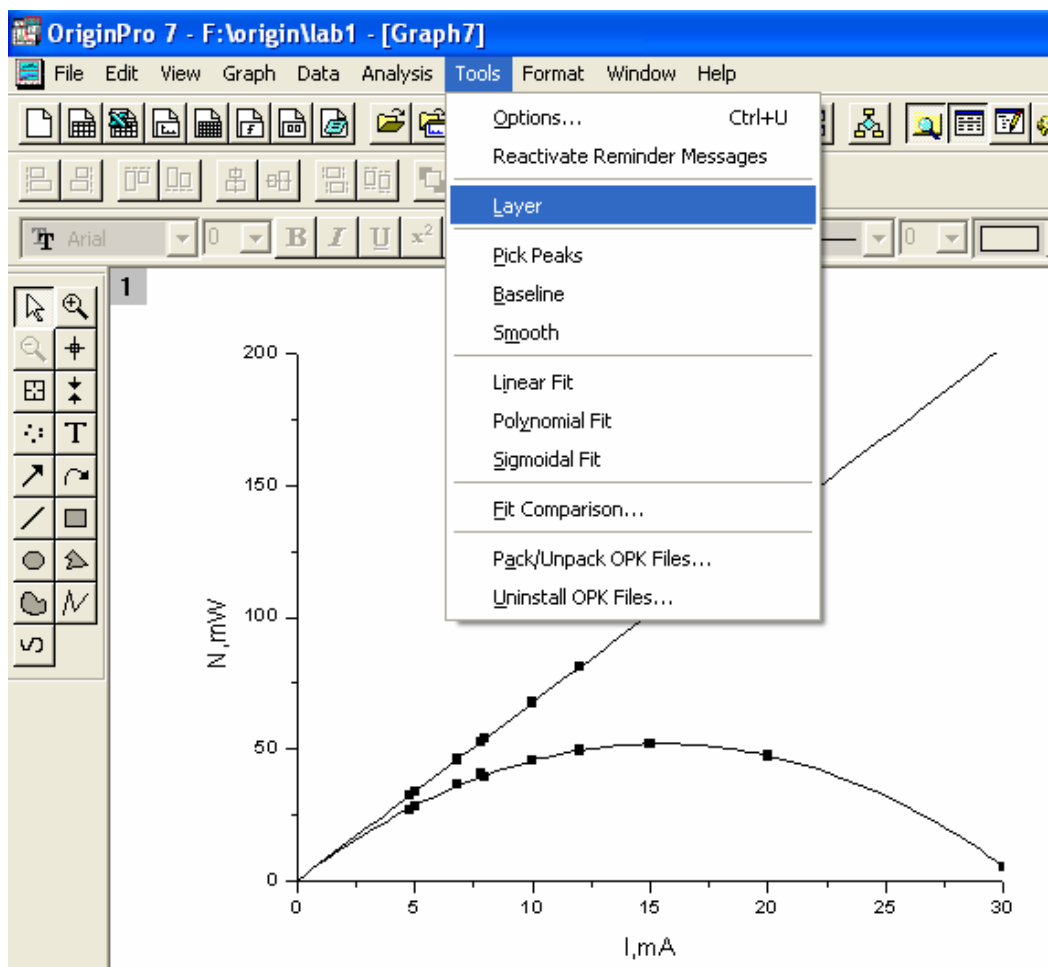


Рис. 1.23. Набор инструментов и опций для добавления нового слоя

Следуя выше указанному способу, отобразить на графике кривую $\eta = \eta(I)$ (задавая вид функции, использовать формулу (1.18)).

Соответствующим образом отредактировать координатные оси и легенды графиков. Легенду для первого слоя оформить в окне Text Control (управление текстом), как показано на рис. 1.24. В том случае, когда имеется несколько слоев, необходимо при создании легенды указать, к какому слою принадлежит тот или иной набор данных. Запись $\backslash 1(1.2)$ означает, что используется второй набор данных из первого слоя.

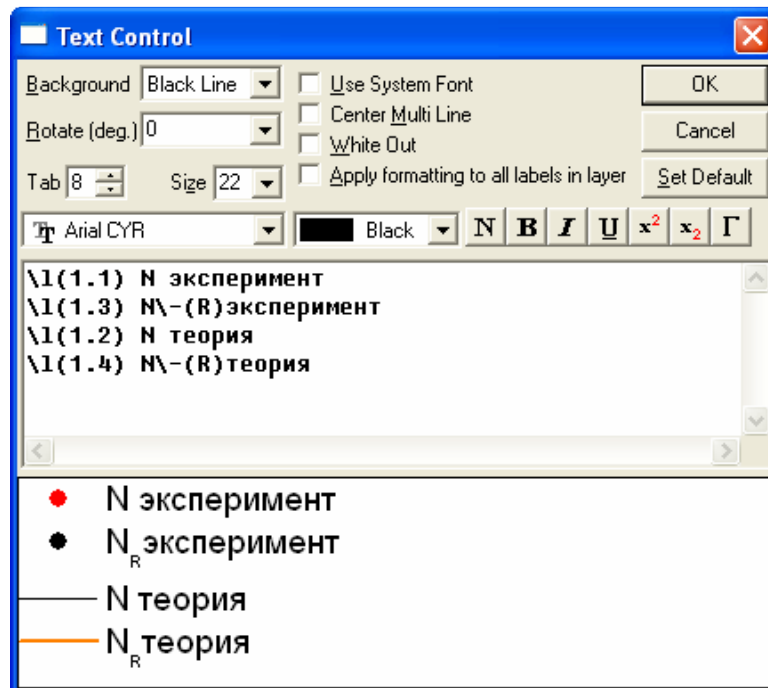


Рис. 1.24. Диалоговое окно для форматирования текста 1 слоя

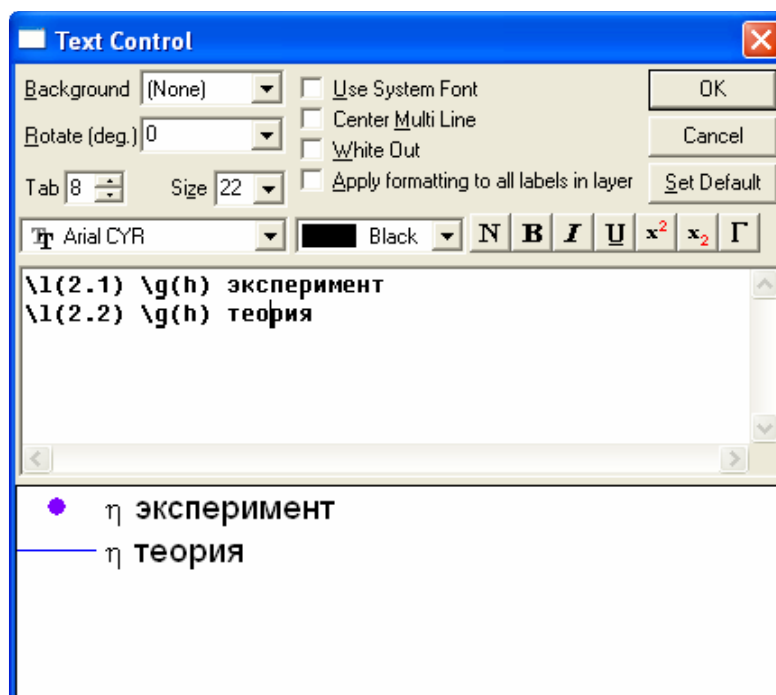


Рис. 1.25 Диалоговое окно для формирования легенды 2 слоя

Создайте легенду для второго слоя. Для этого на пустом месте щелкните правой кнопкой мыши. В контекстном меню выберите пункт Add text (добавить текст). Введите любой текст. Затем, щелкнув правой кнопкой, выберите Properties (свойства) и заполните окно, как показано на рис.1.25.

В результате график приобретет следующий вид (рис.1.26).

При помощи стрелочки, которую можно найти на панели инструментов, находящейся слева, указать принадлежность графика к нужной оси.

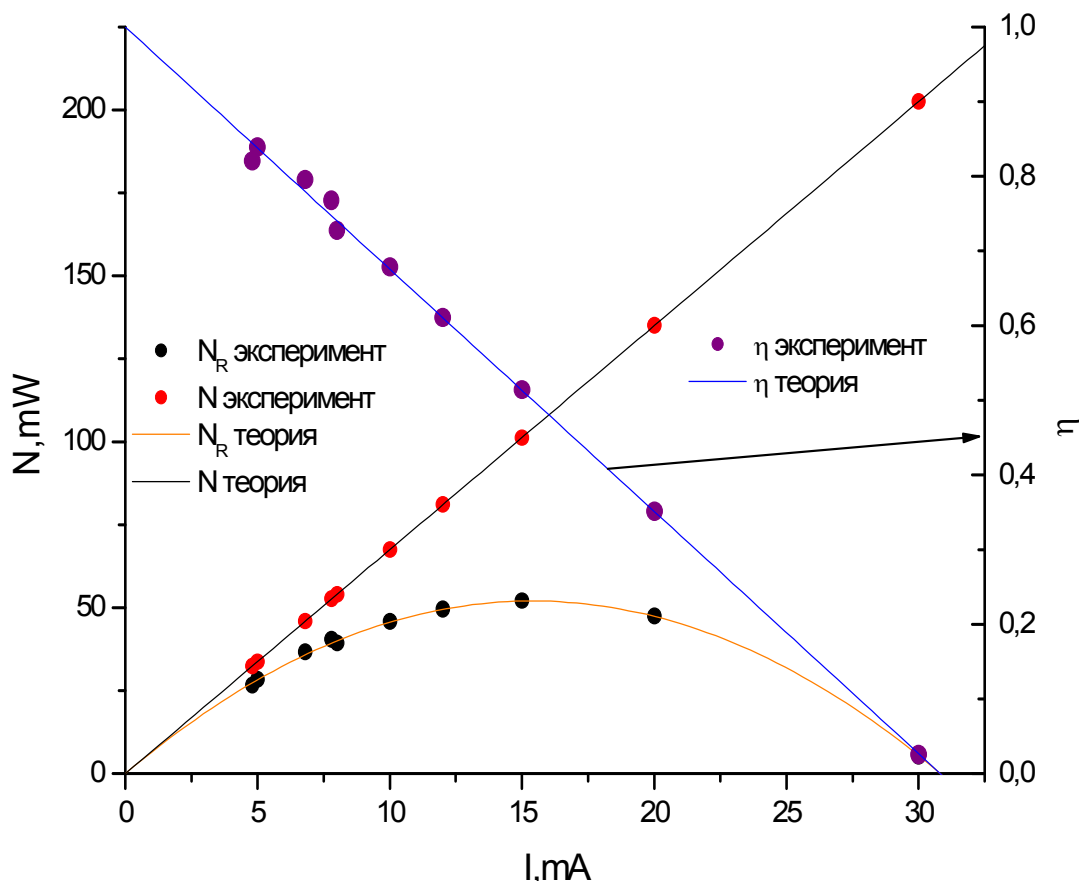


Рис. 1.26. Использование слоев для совмещения графиков в разных масштабах

Имеется альтернативный способ отобразить на одной плоскости вместе два разномасштабных графика. Для этого вы можете воспользоваться встроенным в пакет Origin шаблоном Double-Y (совмещение графиков) для создания подобных рисунков. Рассмотрим пример совмещения графиков зависимостей полезной мощности и КПД от сопротивления ($N_R = N_R(R)$ и $\eta = \eta(R)$). Для этого в таблице колонкам F и D задать роль Y, а колонке C – роль X. Выделить эти колонки. В меню Plot (график) выбрать пункт Special Line/ Symbol (специальные линии/ символы) и в выпадающем списке выбрать шаблон Double-Y (совмещение графиков) (рис.1.27).

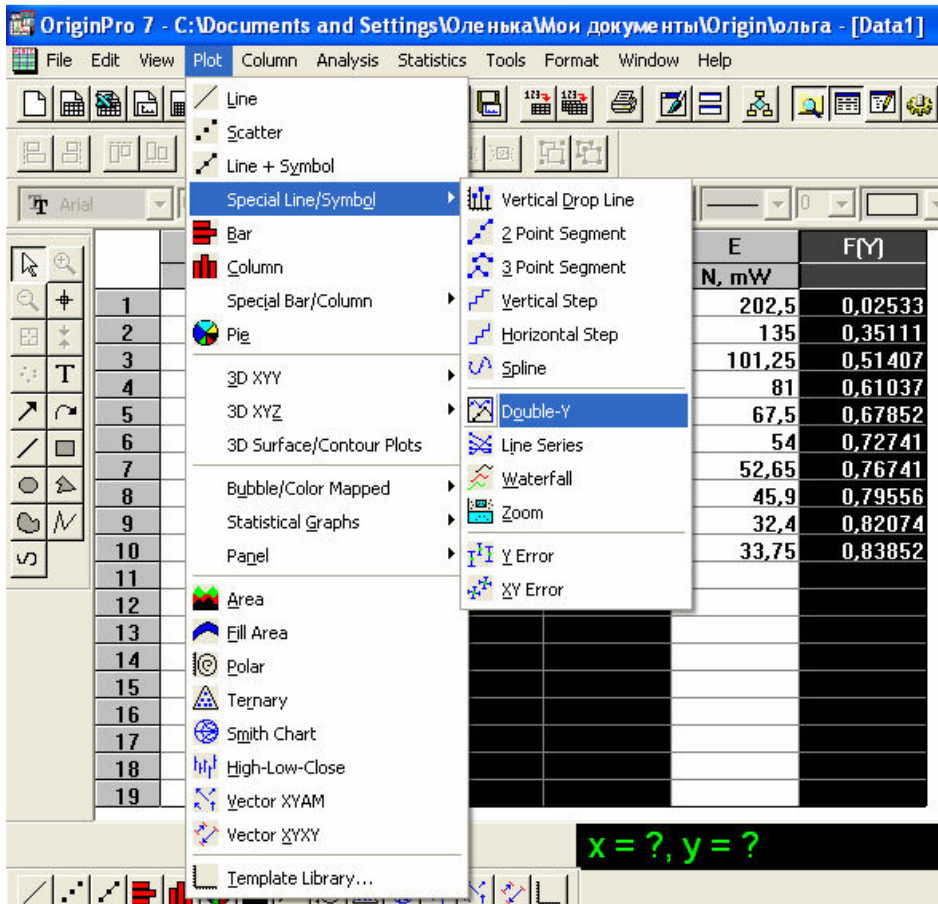


Рис. 1.27. Шаблон для построения совмещенных графиков

Отобразится график, изображенный на рис. 1.28, который соответственно необходимо редактировать известными вам способами.

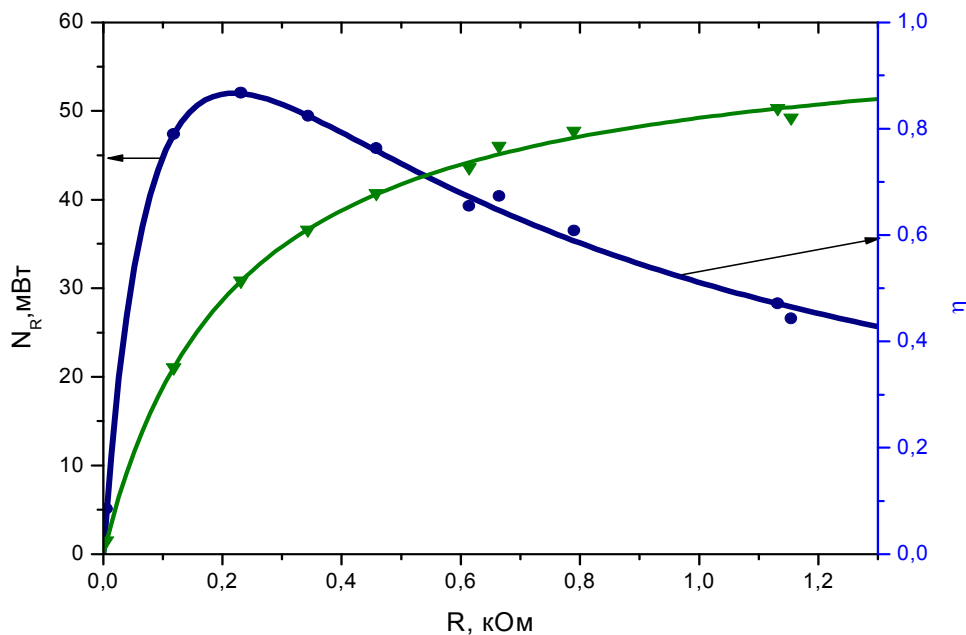


Рис. 1.28 Результат использования шаблона Double-Y

1.4. Формирование листа отчета

После обработки всех данных, нужно вывести результаты на лист отчета. В меню File (файл) выбрать New → Layout (новое → расположение) (рис. 1.29), нажать ОК. На этом листе щелкнуть правой кнопкой мыши, появится подменю с указанием объектов (таблицы, графики, текст), которые можно расположить на отчетном листе (рис. 1.30, 1.31).

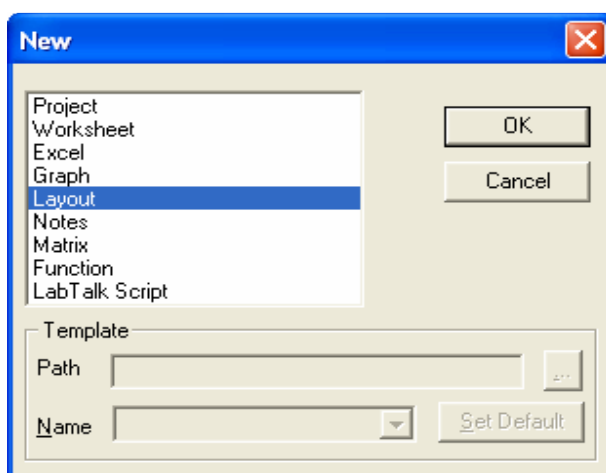


Рис. 1.29. Диалоговое окно, позволяющее выбрать новый объект для работы

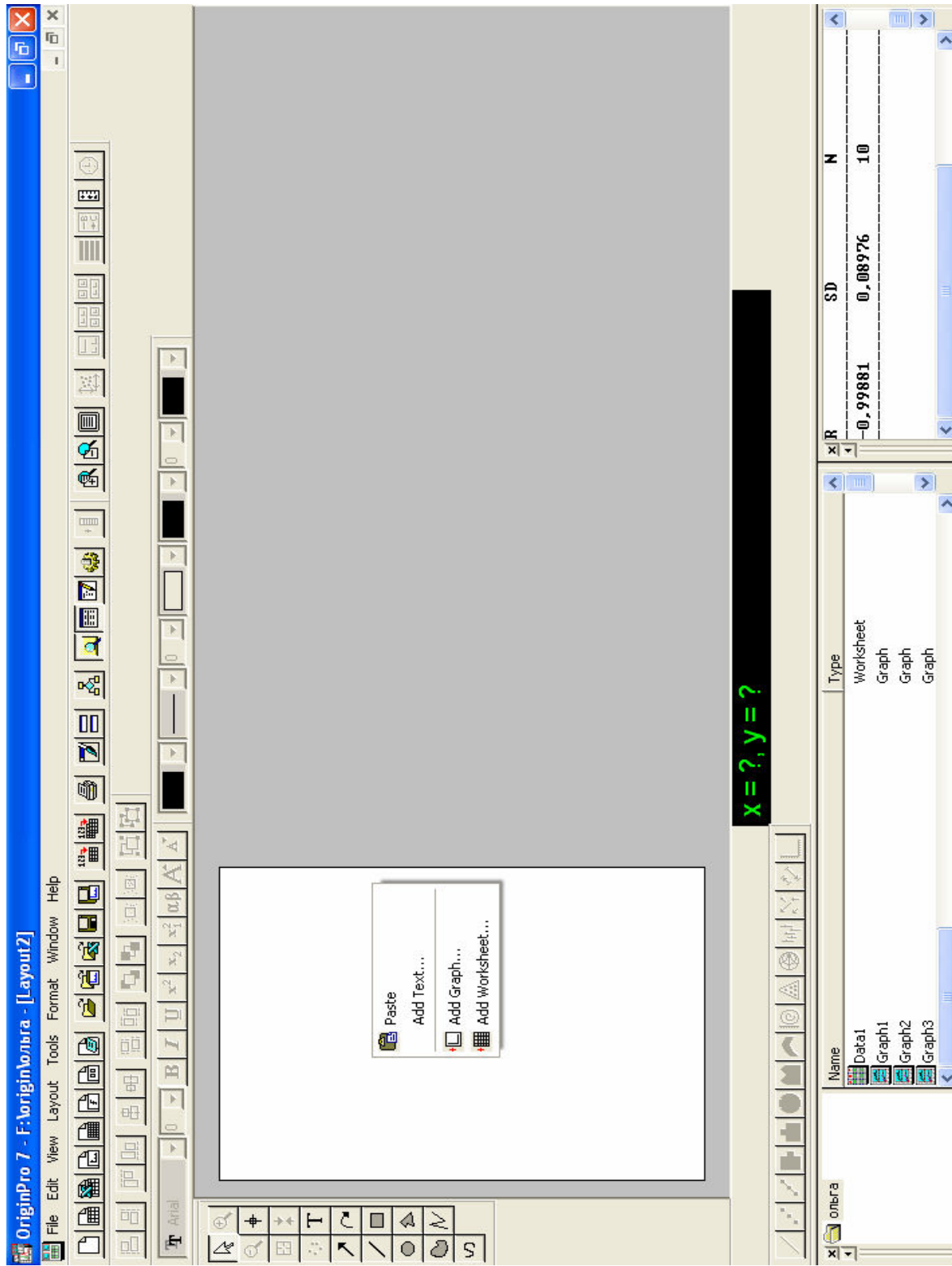


Рис. 1.30. Лист отчета

2. Функциональные масштабы

В физике часто используются функциональные масштабы, например, логарифмический. Применение функциональных масштабов (логарифмический и обратный) рассмотрим на примере лабораторной работы.

Лабораторная работа

«Изучение температурной зависимости сопротивления полупроводника и определение энергии активации полупроводника»

Оборудование: нагреватель со встроенным термометром и полупроводником, мост постоянного тока, мультиметр.

Краткая теория.

Как предсказывает зонная теория, температурная зависимость сопротивления полупроводников описывается формулой

$$R = Ae^{\frac{W_a}{kT}}. \quad (2.1)$$

A – константа, зависящая от размеров полупроводника и концентрации валентных электронов;

$k = 0,87 \cdot 10^{-4}$ эВ/К – постоянная Больцмана;

T – температура по шкале Кельвина;

W_a – энергия активации в электрон-вольтах.

Из зависимости $R(T)$, используя формулу (2.1), можно определить энергию активации W_a . Для этого прологарифмируем (2.1):

$$\ln R = \ln A + \frac{W_a}{k} \cdot \frac{1}{T}. \quad (2.2)$$

Как видно из выражения (2.2), зависимость $\ln R \left(\frac{1}{T} \right)$ должна быть линейной, с тангенсом угла наклона:

$$\frac{W_a}{k}. \quad (2.3)$$

Таким образом, построив график $\ln R \left(\frac{1}{T} \right)$, можно найти энергию активации, как угловой коэффициент.

Результаты измерения сопротивления полупроводника представлены в таблице 2.1:

Таблица 2.1.

t, °C	100	95	90	85	80	75	70	65	60	55	50	45	40	35	30
R, Ом	380	436	479	530	590	644	718	797	880	989	1114	1251	1406	1604	1810

Обработка данных при помощи пакета Origin, используя знания, полученные при выполнении предыдущей работы.

1. Заполнить первые 2 колонки таблицы полученными значениями.

$t, ^\circ\text{C}$	$R, \text{Ом}$	$T, \text{К}$	$1/T, \text{К}^{-1}$	$\ln R$

2. Произвести необходимые вычисления для заполнения остальных колонок таблицы.
3. По данным 4 и 5 колонок таблицы построить график зависимости $\ln R\left(\frac{1}{T}\right)$. Провести линейную аппроксимацию, отредактировать название осей и подписать легенду известными Вам способами. Должен отобразиться следующий график (рис.2.1):

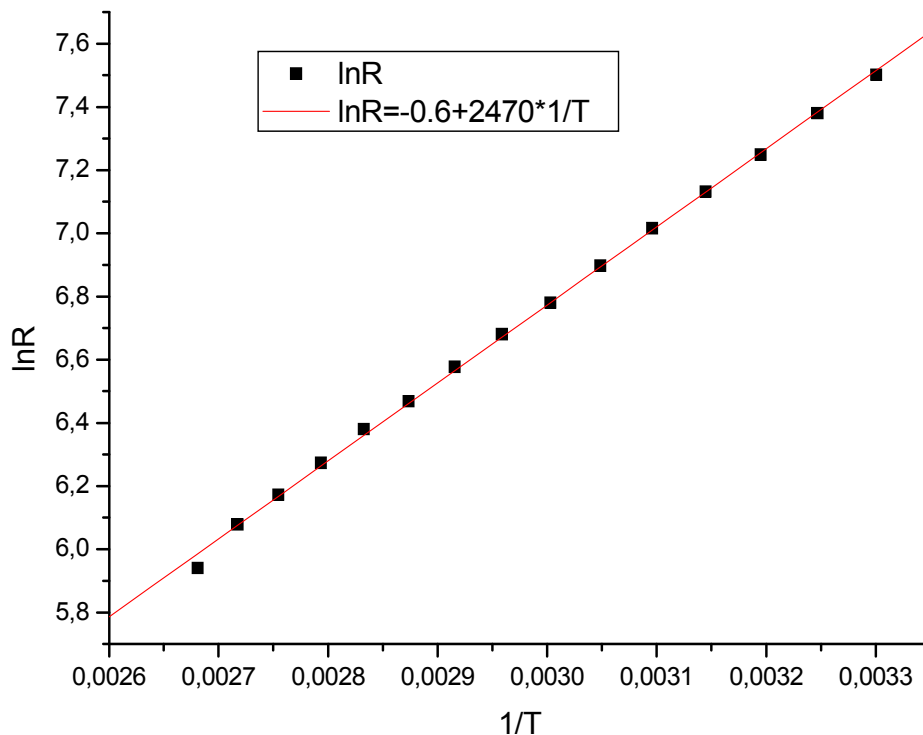


Рис. 2.1. График зависимости $\ln R(1/T)$

4. Определить энергию активации полупроводника. Для этого необходимо открыть новую таблицу. В первую колонку занести значение параметра B из протокола результатов. Данный параметр является отношением энергии активации W_a к постоянной Больцмана k в вы-

ражении (2.2) ($B = \frac{W_a}{k}$). Используя это отношение, во второй колонке задать выражение для энергии активации, вызвав диалоговое окно **Set Column Values** (установить значение колонки).

Получить энергию активации можно было гораздо проще, используя функциональные масштабы. Функциональные масштабы широко применяются для представления функций в самых разнообразных случаях. Например, логарифмический масштаб по оси ординат может быть полезен, когда функция меняется на большом диапазоне. Функциональные масштабы используют для визуальной проверки предполагаемой зависимости измеряемой величины от некоторого параметра. В нашем случае, например, чтобы выяснить, какова зависимость логарифма сопротивления от обратной температуры, нужно в таблице данных выделить соответствующие колонки (R и T), отобразить на графике эту зависимость в виде точек (рис.2.2). Как видно, прямая линия здесь не прослеживается.

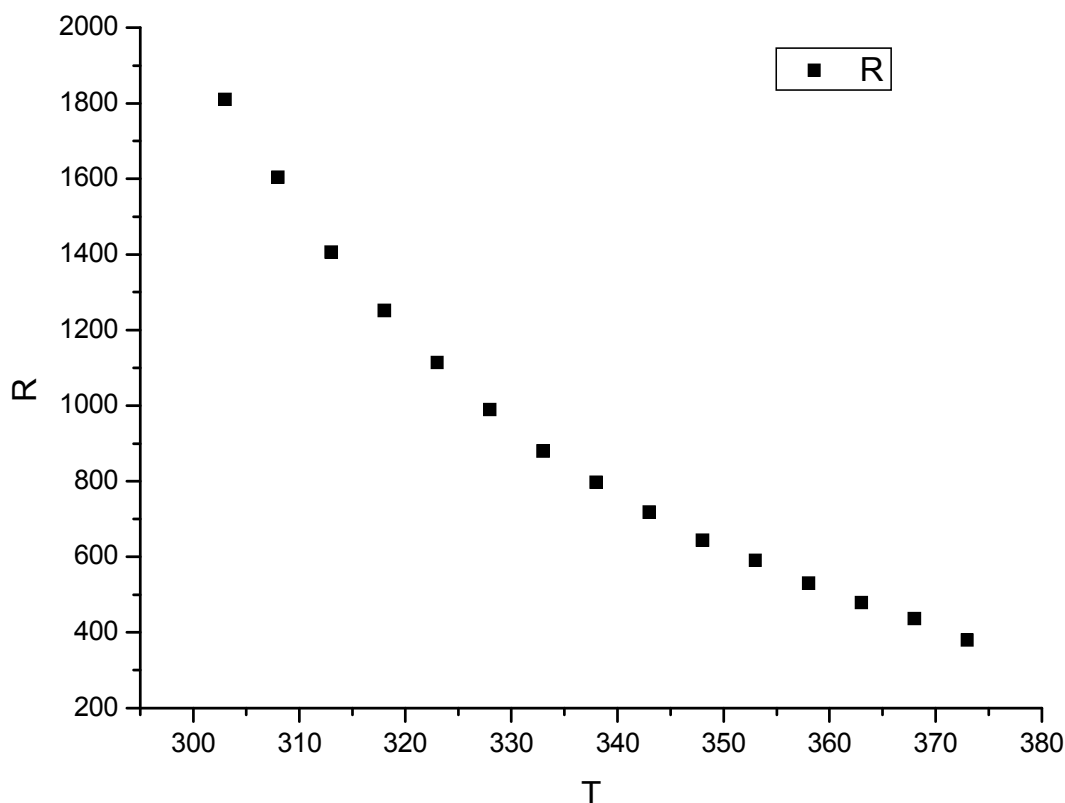


Рис.2.2. Зависимость сопротивления полупроводника от температуры

Применим логарифмический и обратный масштабы. Щелкнув дважды по координатным осям, вызываем диалоговое окно для их редактирования. В выпадающем списке **Type** (тип) выбираем тип масштабирования по осям: для горизонтальной оси выбираем тип **Reciprocal** (обратный) (рис.2.3), а для вертикальной оси – тип **ln** (логарифмический) (рис.2.4).

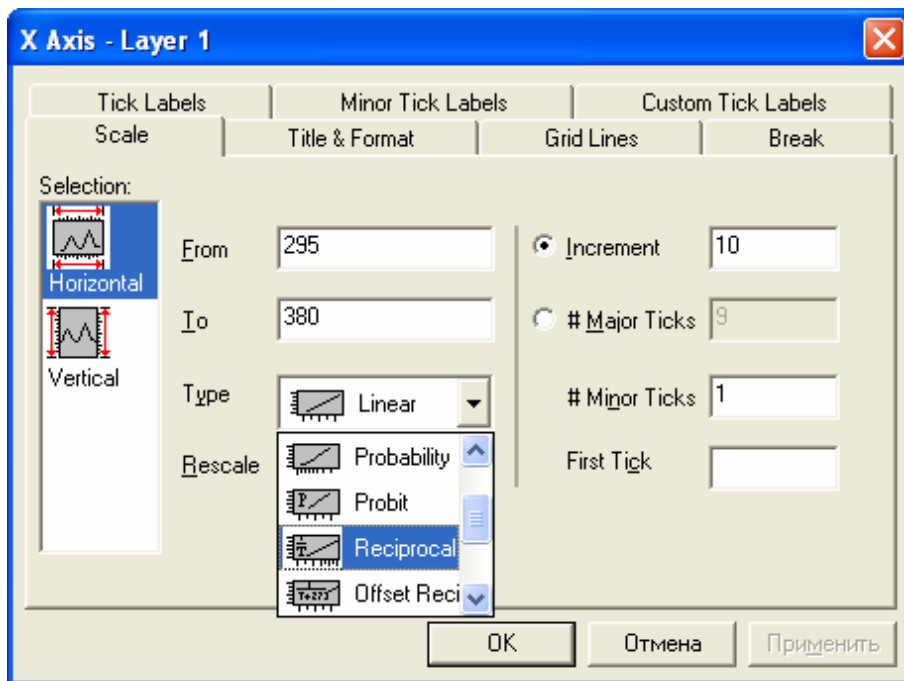


Рис.2.3. Выбор типа горизонтальной оси (обратная)

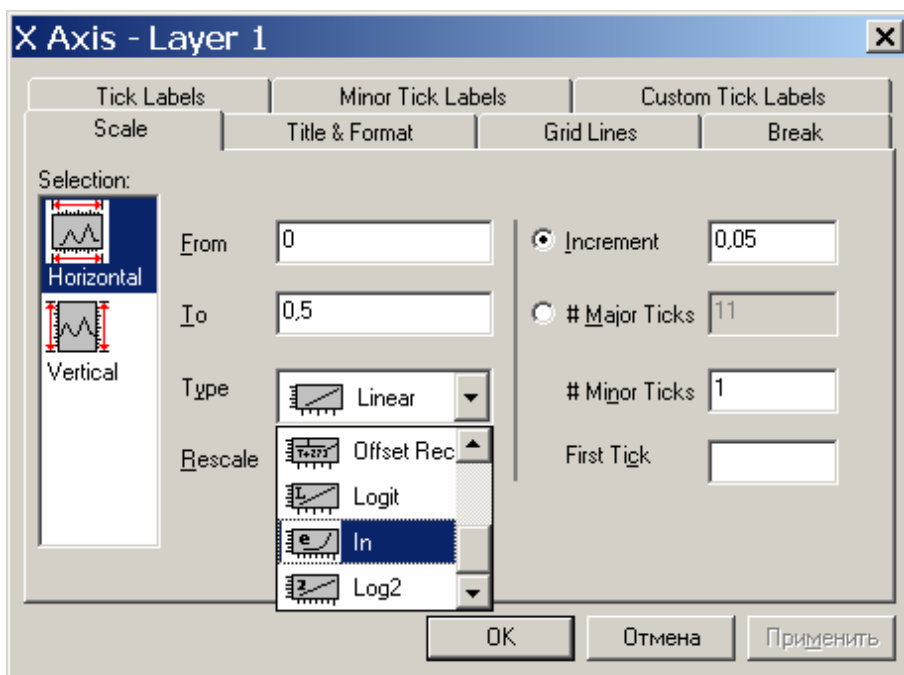


Рис.2.4. Выбор типа вертикальной оси (логарифмическая)

Проведем линейную аппроксимацию, используя пункт меню **Analysis** (анализ). Теперь наш график в логарифмическом масштабе по оси Y и обратном масштабе по оси X выглядит следующим образом (рис.2.5).

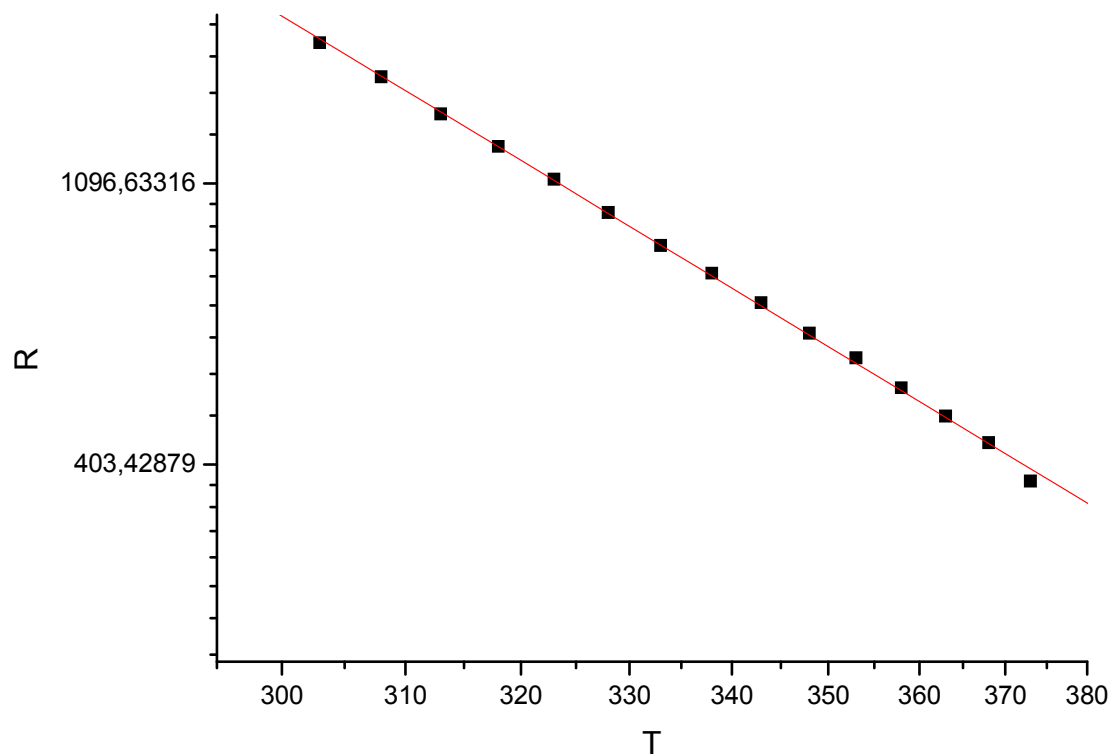


Рис. 2.5. Зависимость сопротивления полупроводника от температуры с использованием функциональных масштабов

Обратите внимание, что по горизонтальной метке значения соответствуют температуре, но график строится от величины $1/T$. По вертикальной оси метки идут неравномерно, что свидетельствует о наличии логарифмической шкалы. Заметим, что $\ln 403,42879 = 6$, а $\ln 1096,63316 = 7$.

Из протокола результатов видно, что параметры аппроксимирующих прямых в обоих случаях одинаковы (рис. 2.6).

```
[22.05.2007 10:41 "/Graph1" (2454242)]
Linear Regression for Data1_E:
Y = A + B * X
```

Parameter	Value	Error
A	-0,63645	0,06231
B	2470,03913	20,93268

R	SD	N	P
0,99953	0,01547	15	<0.0001

```
[22.05.2007 10:44 "/Graph2" (2454242)]
Linear Fit for Data1_B on linearized scales.
yscale(Y) = A + B * xscale(X)
where scale() is the current axis scale function.
```

Parameter	Value	Error
A	-0,63645	0,06231
B	2470,03913	20,93268

R	SD	N	P
0,99953	0,01547	15	<0.0001

Рис. 2.6. Результаты аппроксимации

3. Разрыв оси, вставка увеличенного фрагмента графика

3.1. Разрывы осей координат

Если функция имеет существенно разное поведение в различных областях и эти области удалены друг от друга, то целесообразно воспользоваться возможностью разорвать график неотображаемой областью. Это можно сделать, вызвав диалоговое окно для редактирования координатных осей, на закладке **Break** (разорвать). Для того чтобы отобразить разрыв, необходимо в выпадающем списке установить флажок **Show Break** (показывать разрывы), и вам станут доступны остальные переключатели и поля на этой закладке (рис. 3.1).

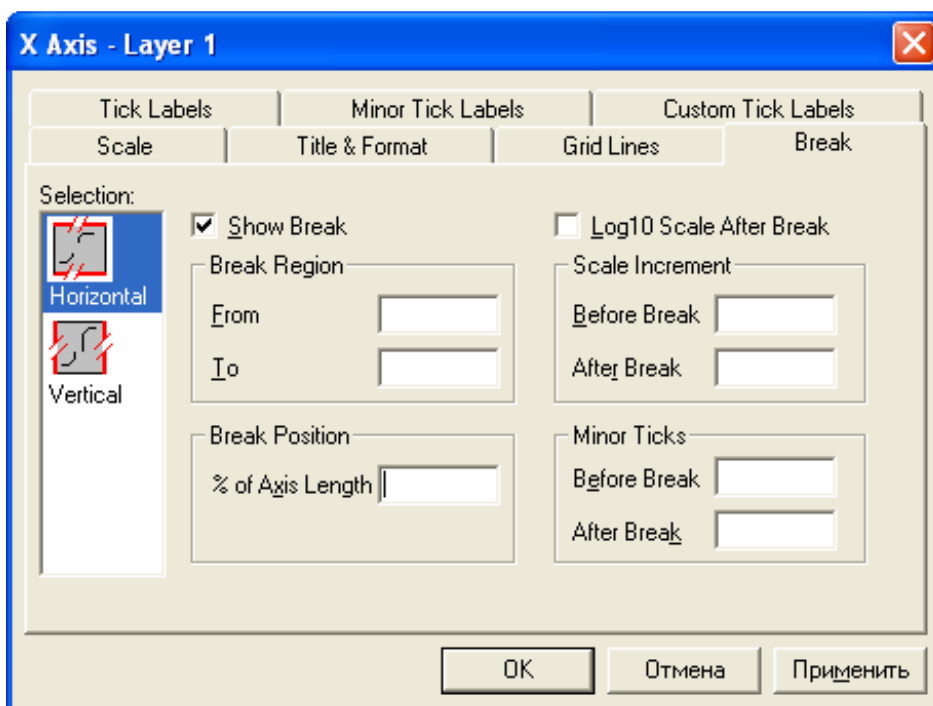


Рис. 3.1. Параметры разрыва оси определяются на закладке Break.

В списке **Selection** (выделение), находящемся слева, выберите, для какой оси вы делаете разрыв. В группе **Break Region** (область разрыва) укажите, с какого **From** (от) по какое **To** (до) значение оси будет проходить разрыв. В группе **Break Position** (положение разрыва) в поле **% of Axis Length** (% от длины оси) вы можете задать местоположение символа разрыва. В группе **Scale Increment** (шаг шкалы) в полях **Before Break** (перед разрывом) и **After Break** (после разрыва) можно указать шаг основной штриховки на оси, соответственно до разрыва и после. А в группе **Minor Ticks** (вспомогательные штрихи) в полях **Before Break** (перед разрывом) и **After Break** (после разрыва) – количество вспомогательных штрихов между основными (соответственно, до и после разрыва). Вот, например, как после разрыва выглядит следующий график, построенный по данным из таблицы 3.1. (рис. 3.2, 3.3):

Таблица 3.1.

A	F
0	1
0,05	4,9728
0,1	26,9057
0,11	43,8577
0,12	82,0981
0,13	203,4309
0,14	1161,05093
0,141	1526,04334
0,142	2258,91691
0,143	3197,19987
0,144	4217,49334
0,145	4651,74449
0,146	4890,64212
0,147	3777,82948
0,148	2421,99678
0,149	2007,28313
0,15	454,32847
0,1525	207,10355
0,155	112,79113
0,16	56,51468
0,165	34,56576
0,17	23,00503
0,18	13,27151
0,19	8,8615
0,2	6,59129
0,225	3,92008
0,25	2,80084
0,3	1,94028
0,35	1,65101
0,4	1,57838
0,45	1,59843
0,5	1,61187

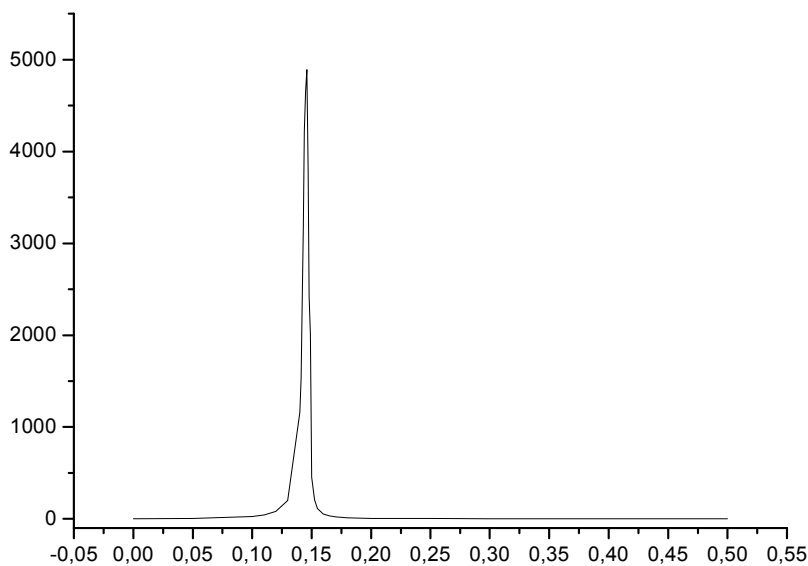


Рис. 3.2.. График без разрывов осей

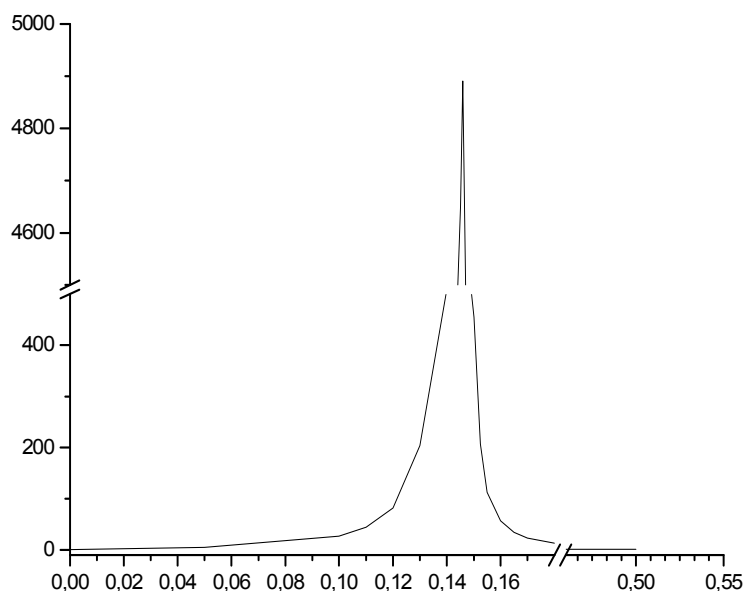


Рис. 3.3. График с разрывами осей

В Таблице 3.1 приведено распределение кластеров по размерам. Более наглядно можно продемонстрировать разрыв, используя отображение данных в виде гистограмм. Построение гистограмм с разрывом оси освоим на примере данных полученных в результате компьютерного эксперимента. Заполнив таблицу данных (Таблица 3.2), выделите эти колонки, и на нижней панели инструментов выберите значок **Column** (столбец). Отобразится следующий график (рис. 3.4). Т.к. наибольшее значение (1 строка таблицы 3.1) и следующее по величине значение (7 строка) отличаются почти в 50 раз, поэтому гистограмма получается малоинформативной.

Таблица 3.2

A	B
	5%
1	733011,43
2	0,09
3	3,33
4	69,77
5	811,46
6	5337,29
7	15077,3
8	7,24
9	63,12
10	396,51
11	1526,04
12	2966,89
13	952,98
14	65,14
15	241,43
16	591,6
17	811,53
18	509,82
19	155
20	132,39

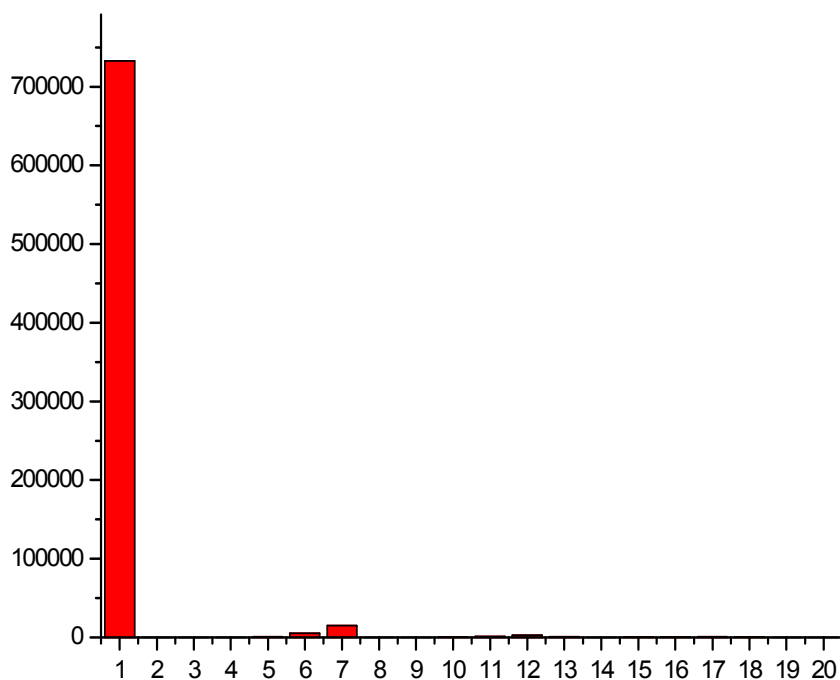


Рис. 3.4. Пример малоинформативной гистограммы

Чтобы сделать рисунок более наглядным, разрыв целесообразно делать по оси Y, указав соответствующий диапазон (например от 15100 до 600000).

Задать местоположение символа разрыва – 75%. Установить шаг основной штриховки на оси до разрыва – 2000, после разрыва – 100000 (рис.3.5).

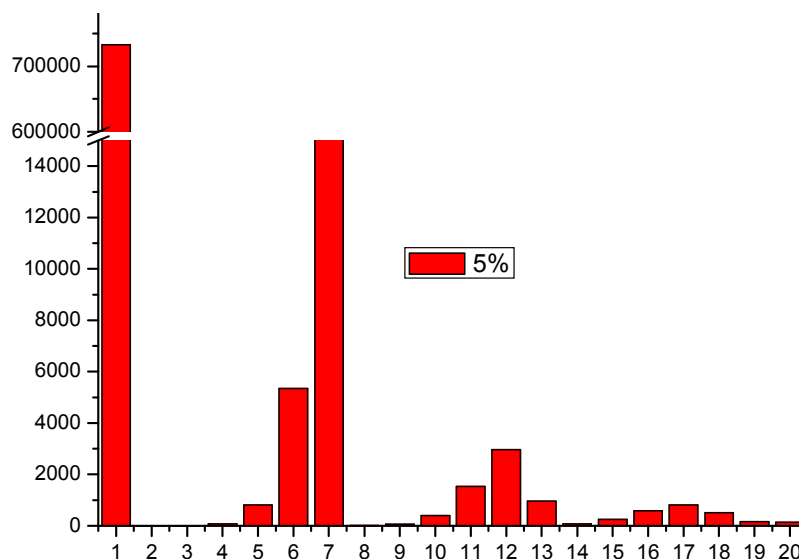


Рис. 3.5. Гистограмма с разрывом оси

3.2. Вставка увеличенных фрагментов графика

Если же вам необходимо более подробно рассмотреть особенности поведения функции (зависимости) на каком-то участке, то в отдельном слое можно создать выделенный фрагмент графика. Возьмем функцию, заданную таблицей 3.1, только теперь наш график по оси Y представим в логарифмическом масштабе (рис.3.6).

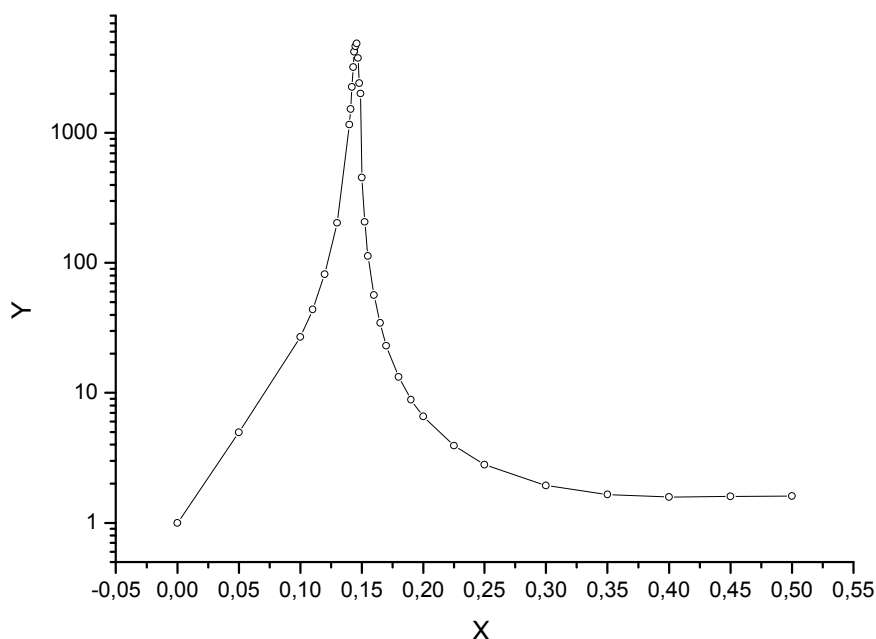


Рис.3.6. График с использованием логарифмического масштаба

Выберите окно с рисунком. Воспользовавшись командой Tools (сервис), вызовите окно Layer (слой), в котором для нас представляет интерес крайняя правая кнопка (рис. 3.7). Здесь же в полях X Scale (ось X) и Y Scale (ось Y) из выпадающего списка можно выбрать необходимый масштаб.

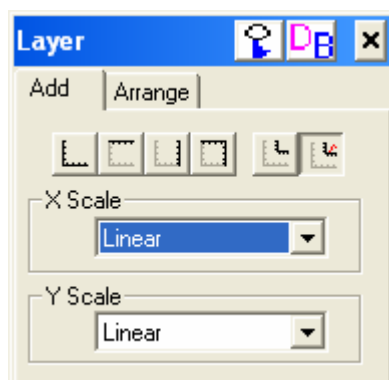


Рис. 3.7. Набор инструментов и опций для добавления нового слоя

Как только вы нажмете крайнюю правую кнопку, на вашем рисунке добавится слой с таким же графиком справа сверху. Щелчком по иконке с цифрой 2 выберите этот слой. Изменить тип оси, интересующий вас диапазон данных и формат подписей нужно самостоятельно. В результате получается следующий график (рис. 3.8).

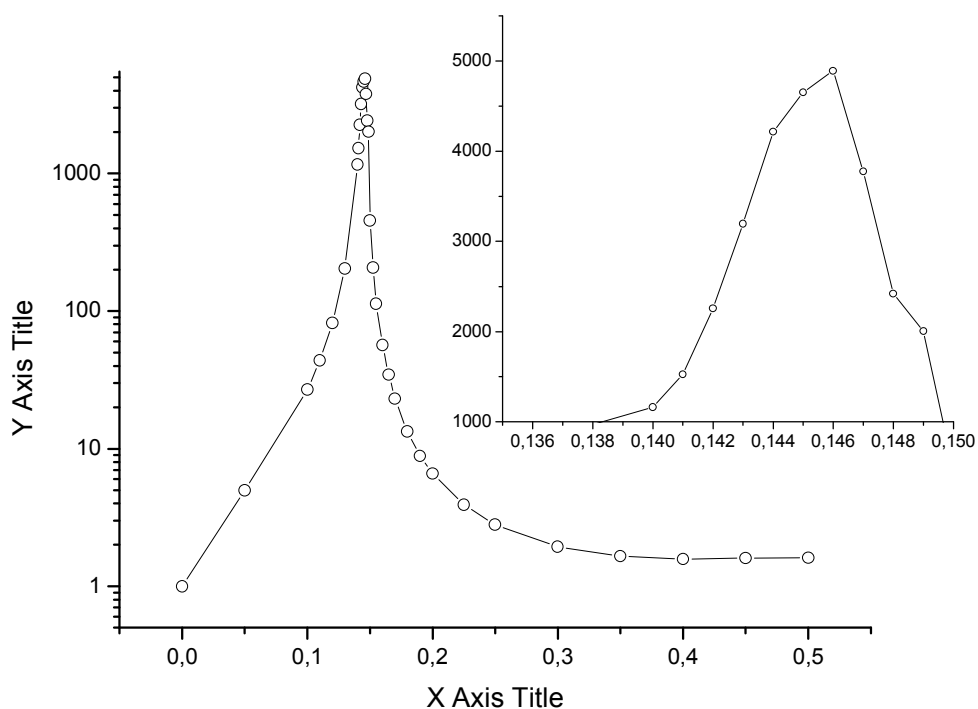


Рис. 3.8. Увеличенный фрагмент графика в виде вставки

Обратите внимание, что благодаря наличию шкалы, нет необходимости указывать, какому фрагменту основного рисунка соответствует вынесенный.

4. Импорт данных и дифференцирование графиков

4.1. Импорт данных

Пакет Origin позволяет импортировать данные различных форматов. Источником данных может быть файл, записанный в формате различных научных программ и баз данных. В частности, данные могут быть записаны в файл формата ASCII³.

После того, как вы запустили программу Origin Pro 7, и перед вами появилась таблица, в меню File (файл) вам будет доступна команда Import / Single ASCII (Импорт / Одиночный ASCII) (рис. 4.1).

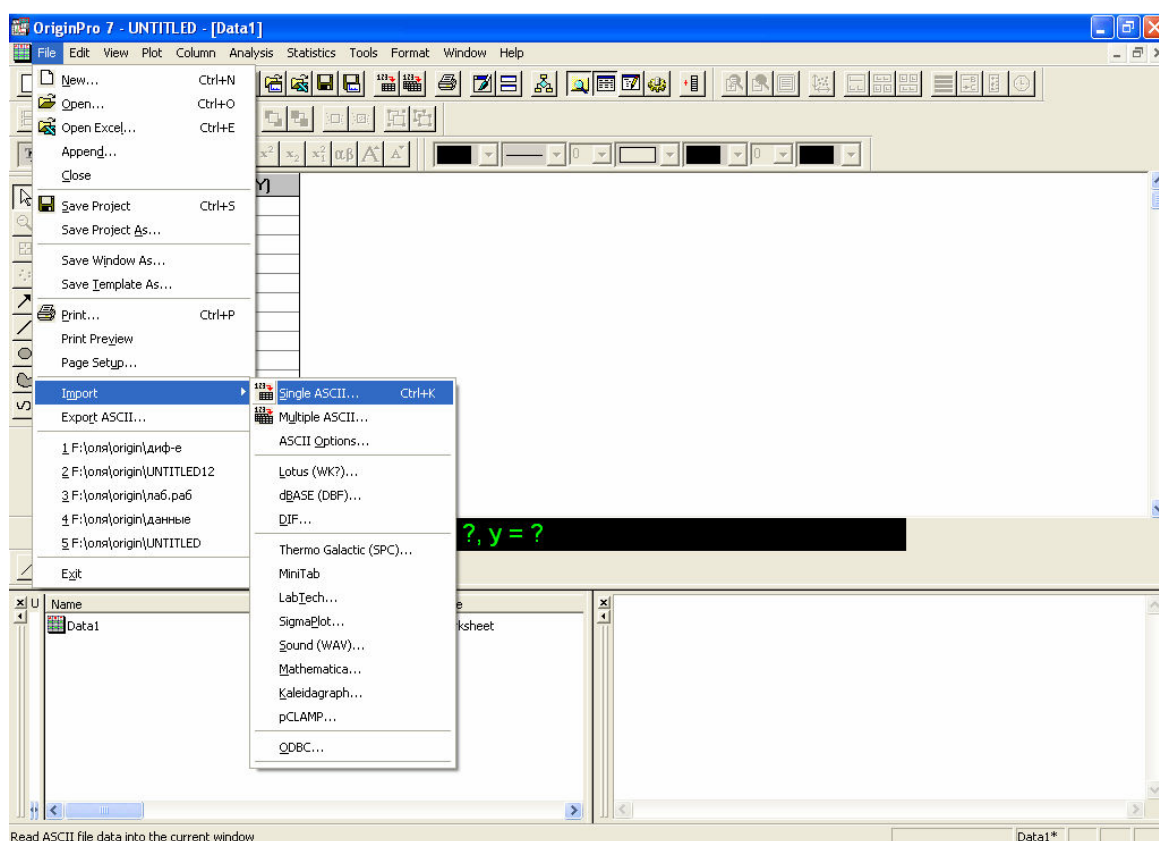


Рис. 4.1. Импорт данных

Файл с данными имеет вид (рис.4.2)

³ ASCII – это текстовый файл, содержащий числа и текст, разделенные какими-либо знаками или специальными символами (разделение может и отсутствовать). Такой файл, как правило, не содержит внутри себя файлового заголовка (например, файл, созданный в текстовом редакторе Блокнот).

A	B	C	D
T, K	energy, K	error	magnetization
50	-545	0	3,15
100	-544	0	3,14
150	-541	-2	3,14
200	-532	-6	3,14
250	-510	-9	3,1
300	-470	-7	3
310	-457	-8	2,95
320	-444	-11	2,9
330	-431	-10	2,86
340	-415	-10	2,8
350	-398	-11	2,72
360	-381	-10	2,64
370	-361	-11	2,54
380	-339	-10	2,42
390	-318	-9	2,28
400	-282	-14	2,02
410	-230	-15	1,13
420	-203	-5	0,469
425	-190	-9	0,26
450	-161	-10	0,0496
475	-145	-9	0,115
500	-133	-7	0,0497
525	-123	-9	0,0821
550	-116	-7	0,0428

Рис. 4.2. Файл с данными в формате ASCII

В появившемся стандартном запросе имени файла выберите нужный и нажмите Открыть (рис.4.3).

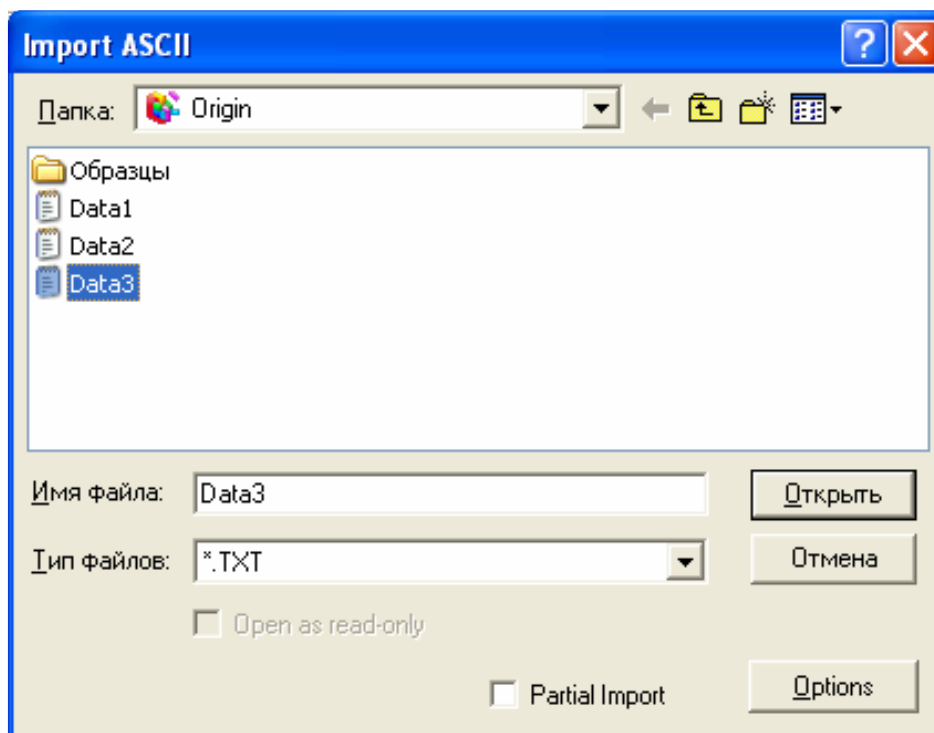


Рис.4.3. Окно импорта данных

Должна появиться следующая таблица с импортированными данными (рис. 4.4).

	A(X)	B(Y)	C(Y)	D(Y)
	A T, K	B energy, K	C error	D magnetizatio
1	50	-545	0	3,15
2	100	-544	0	3,14
3	150	-541	-2	3,14
4	200	-532	-6	3,14
5	250	-510	-9	3,1
6	300	-470	-7	3
7	310	-457	-8	2,95
8	320	-444	-11	2,9
9	330	-431	-10	2,86
10	340	-415	-10	2,8
11	350	-398	-11	2,72
12	360	-381	-10	2,64
13	370	-361	-11	2,54
14	380	-339	-10	2,42
15	390	-318	-9	2,28
16	400	-282	-14	2,02
17	410	-230	-15	1,13
18	420	-203	-5	0,469
19	425	-190	-9	0,26
20	450	-161	-10	0,0496
21	475	-145	-9	0,115
22	500	-133	-7	0,0497
23	525	-123	-9	0,0821
24	550	-116	-7	0,0428

Рис.4.4. Пример импортированных данных

Origin автоматически берет имя файла в качестве имени таблицы и использует текст из файла в качестве подписей столбцов.

4.2. Отображение на графике погрешностей экспериментальных данных

Считанные данные получены в результате компьютерного моделирования. С использованием модели Изинга были найдены зависимости от температуры энергии и намагниченности некоторого образца. Обработав эти данные, мы сможем найти температуру фазового перехода.

Порядок выполнения обработки данных.

- Выделив колонку C, в пункте **Set As** (Установить как) укажите ее роль кнопкой **yEr** (ошибка по Y).

- Постройте графики зависимости энергии и намагниченности от температуры (рис. 4.5, 4.6).

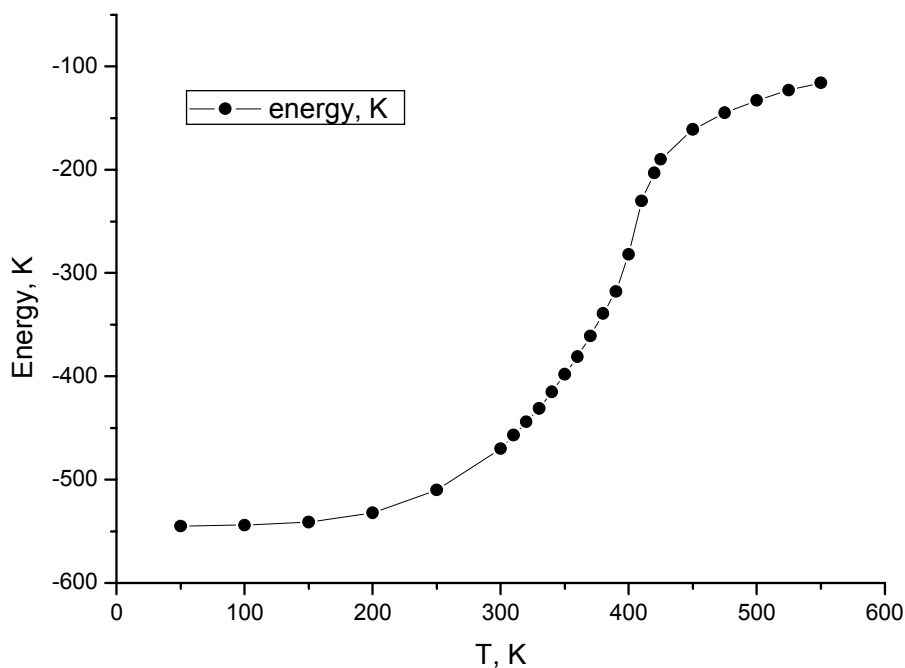


Рис. 4.5 График зависимости энергии от температуры

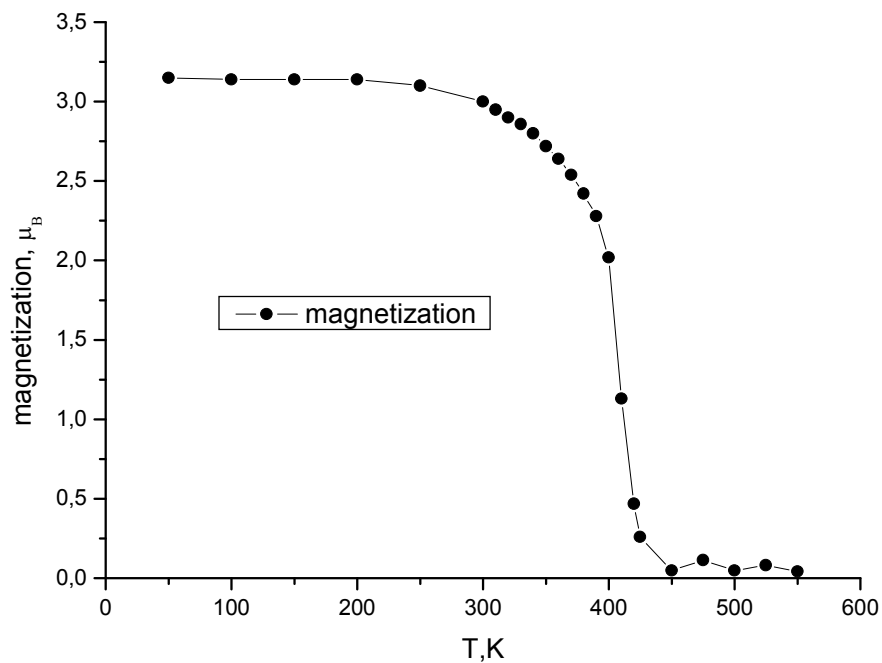


Рис. 4.6. График зависимости намагниченности от температуры

Для того, чтобы на графике отобразились не только экспериментальные точки, но и погрешности, необходимо выделить три колонки (X, Y, uEr) и выбрать тип графика (**Scatter** (точки) или **Scatter+Line** (точки+линия)) (рис.4.7).

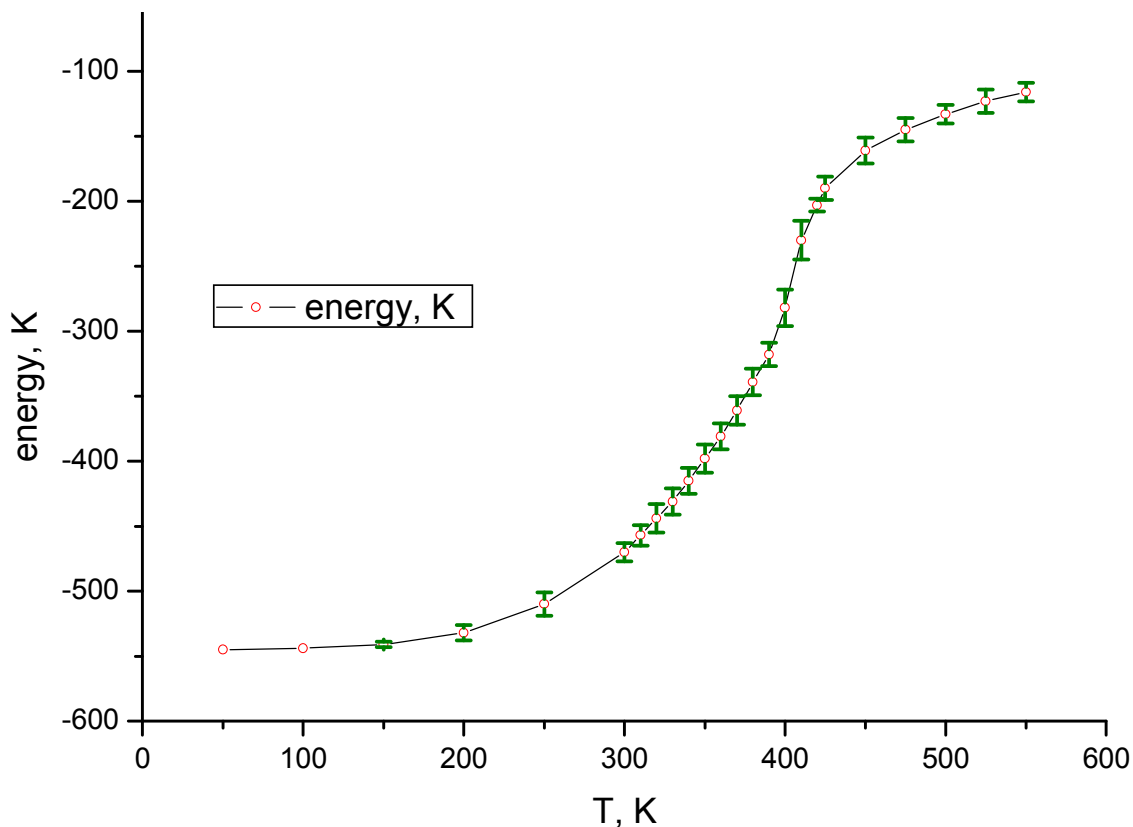


Рис. 4.7. График зависимости энергии от температуры с отображением погрешностей

4.3. Дифференцирование графиков

Полученные графики можно использовать для определения температуры фазового перехода T_C . Как известно, при фазовых переходах второго рода вблизи фазового перехода происходит резкое изменение теплоемкости $C = \frac{\partial E}{\partial T}$ и величины $\frac{\partial M}{\partial T}$. Origin позволяет дифференцировать и интегрировать зависимости, представленные на графиках. Чтобы продифференцировать графики, в пакете Origin имеется встроенный набор средств. Откройте график зависимости энергии от температуры, в меню **Analysis** (анализ) найдите пункт **Calculus** и в выпадающем списке выберите **Differentiate**, отобразится следующий график (рис. 4.8).

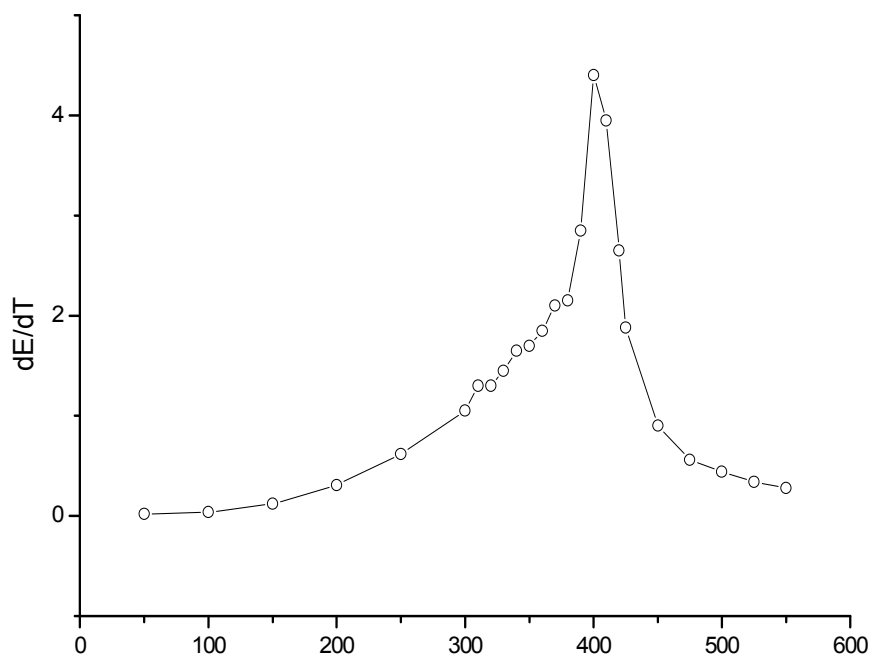


Рис. 4.8. Результаты дифференцирования энергии

Для зависимости намагниченности от температуры проделайте те же действия и получите следующий график (рис.4.9)

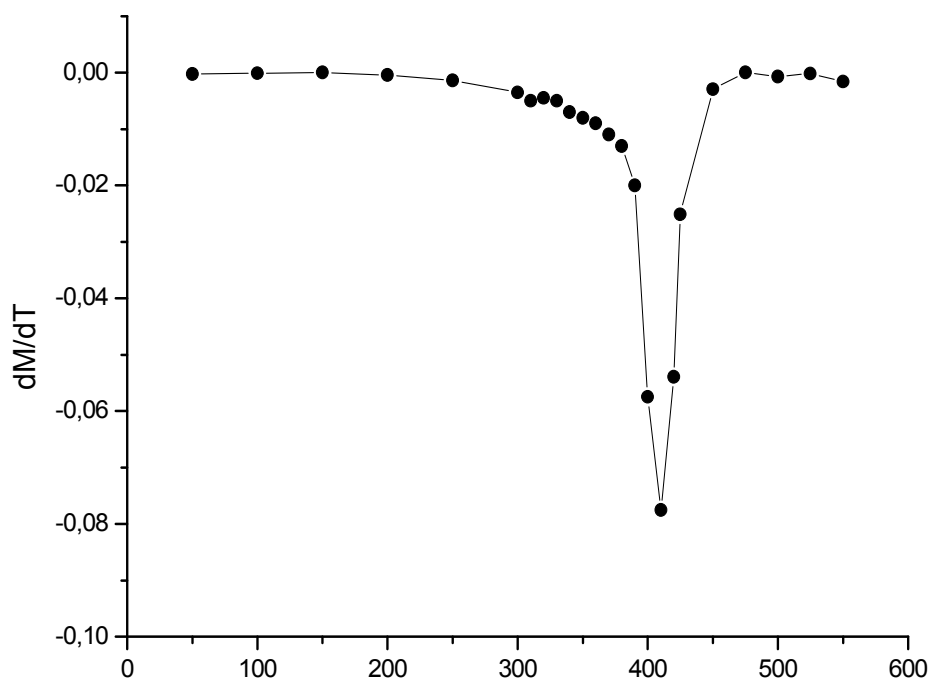


Рис. 4.9. Результаты дифференцирования

Используя полученные навыки работы со слоями, постройте совмещенный график, представленный на рис. 4.10, и убедитесь, что температура фазового перехода, полученная с помощью первого и второго графиков, совпадает в пределах погрешности вычислений.

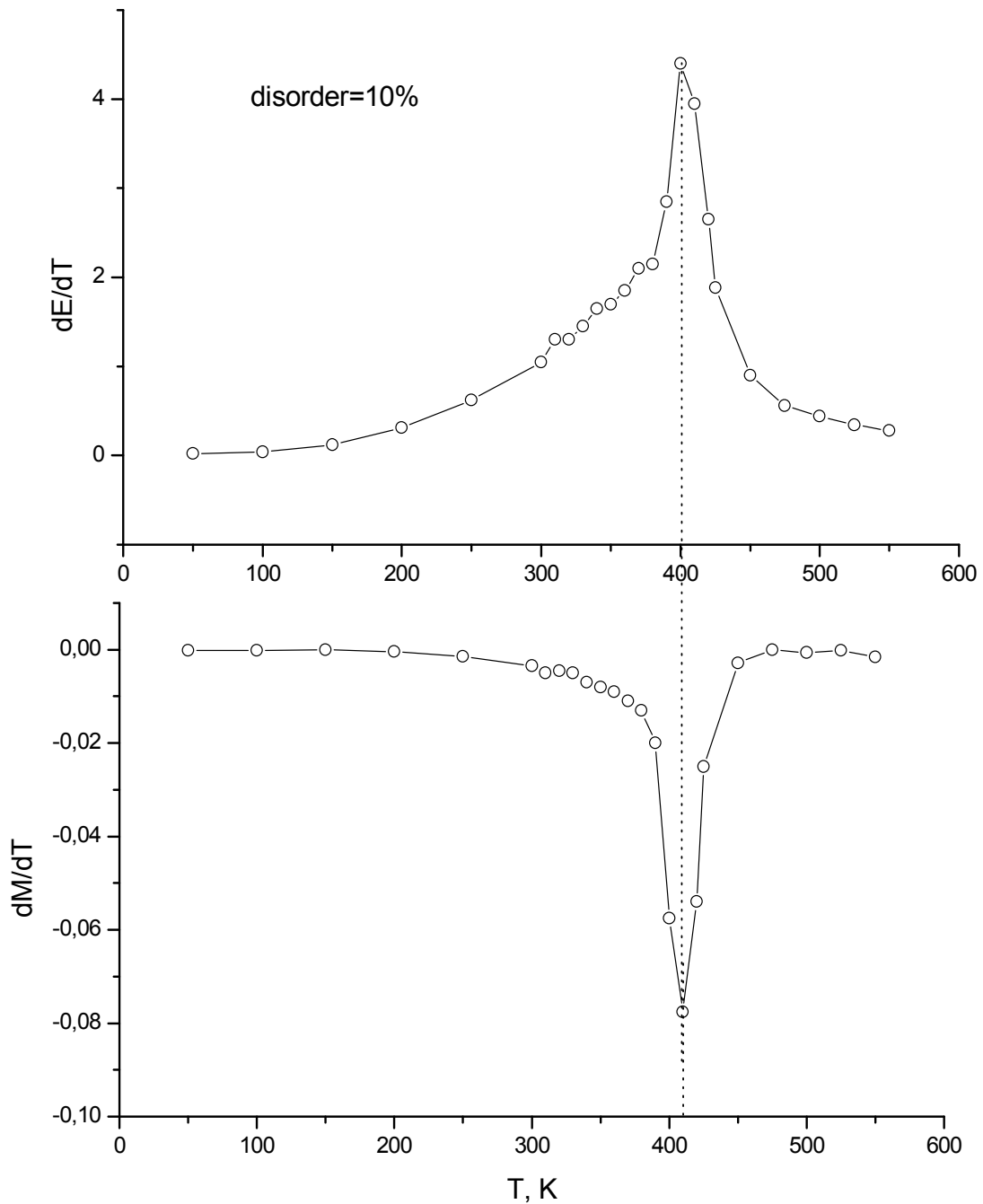


Рис. 4.10. Совмещение графиков с помощью слоев

5. Фурье-фильтрация экспериментальных данных

В научном исследовании одним из способов анализа информации является спектральное представление данных с помощью преобразования Фурье. Рассмотрим пример применения пакетом Origin Фурье-преобразования для фильтрации данных. Воспользуемся реальными экспериментальными данными по хемилюминесценции, предоставленные Н. Ю. Тарасевич (Институт фундаментальных проблем биологии РАН).

Применение Фурье-преобразования для фильтрации данных.

После запуска программы произведите импортирование данных (как импортировать данные, упомянуто выше), затем выделите колонки, отобразите данные в виде точек. Если массив данных очень большой, возможно, отобразятся не все точки. В этом случае должно появиться окно **Reminder Message** (Напоминание) (рис.5.1), в котором вам напоминают, что не все данные из таблицы могут отображаться при построении графика.

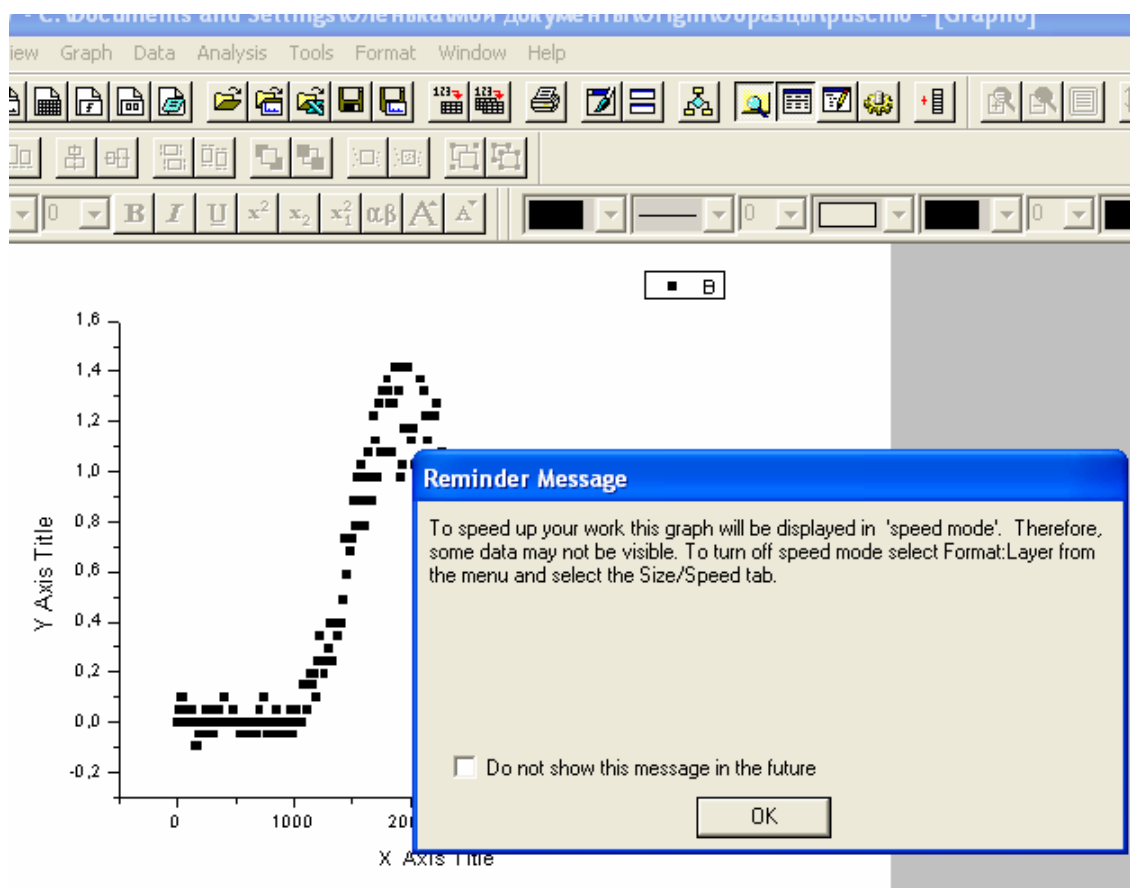


Рис. 5.1. Окно предупреждения

Желательно, чтобы все точки были изображены. Поэтому, на панели инструментов в меню **Format** (формат) выберите пункт **Layer** (слой). Появится окно **Plot Details** (параметры графика), в котором нужно перейти на закладку **Size/Speed** (Размер/Скоростной режим). Здесь вы можете ука-

зять размер рисунка на странице (ширину, высоту, отступ от верхнего левого угла в выбранных единицах измерения). В группе **Speed Mode, Skip Points if needed** (Скоростной режим, пропуск точек при необходимости) убедитесь, чтобы подпункты не были отмечены галочками (рис.5.2). После чего нажмите **Apply** (Применить) и **Ok**. В результате ваш график приобре-

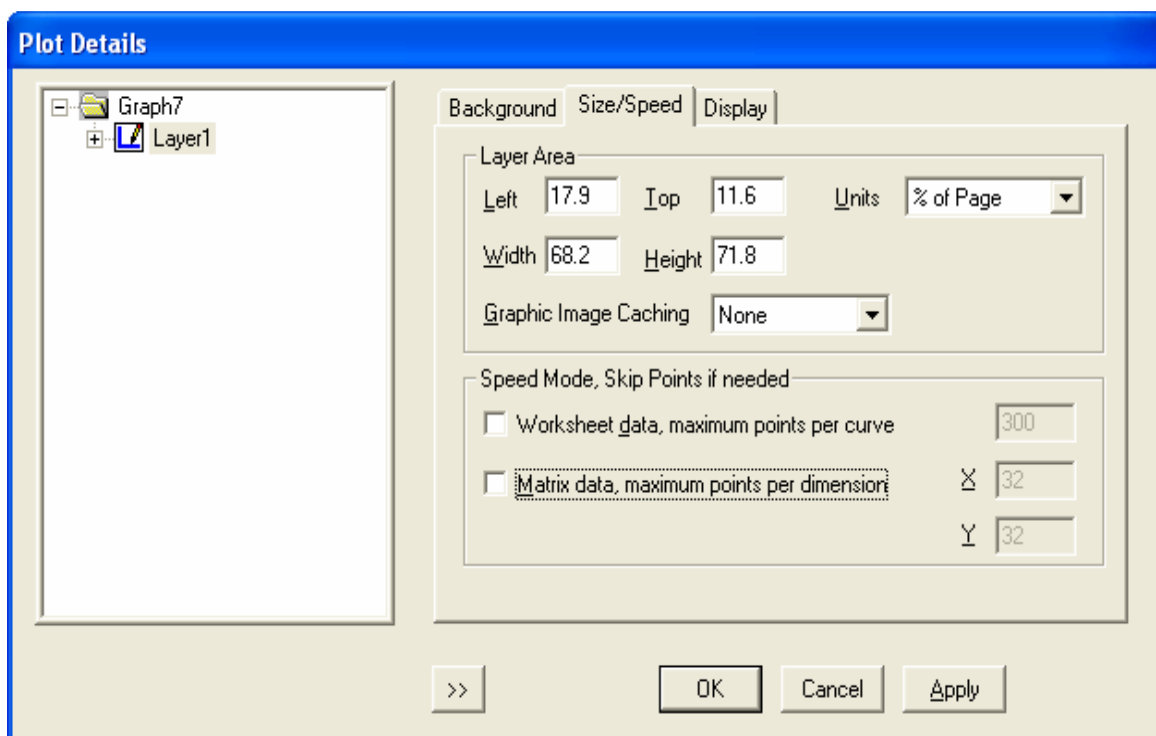


Рис. 5.2. Закладка Size/Speed для настройки свойств слоя

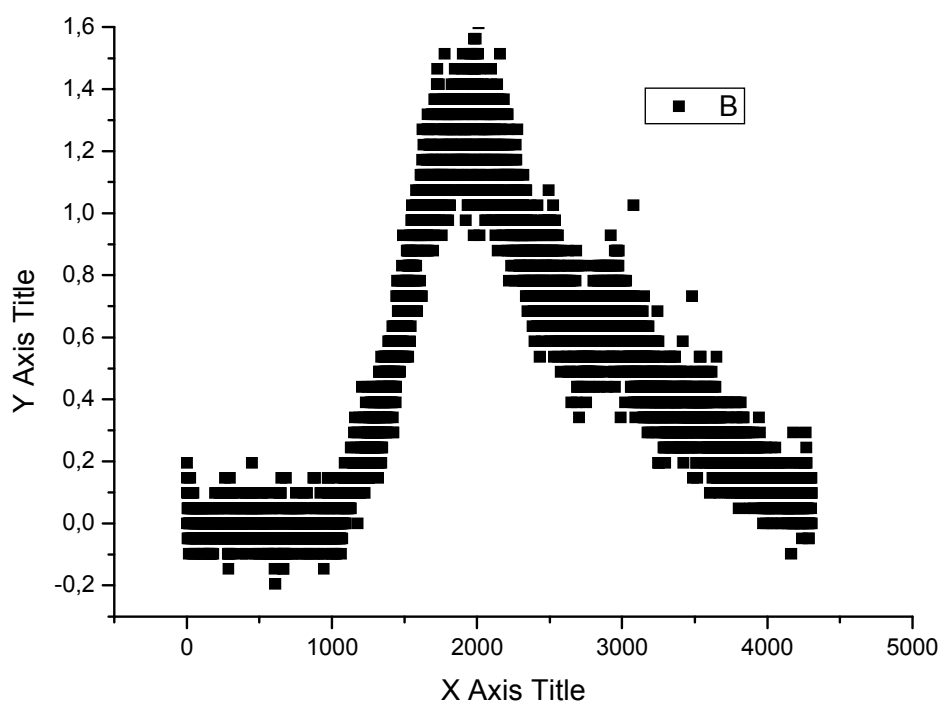


Рис. 5.3. Данные по интенсивности хемилюминесценции

тет следующий вид (рис.5.3).

Мы видим, что в данном случае имеется большой разброс данных. Отношение шум/сигнал составляет около 10%. Попытаемся выделить сигнал и избавиться от шума с помощью Фурье-фильтрации⁴. Для этого в меню выберите Analysis (Анализ), пункт FFT Filter (фильтрация Фурье) и в выпадающем списке щелкните по Low Pass (пропустить низкие частоты) (рис. 5.4).

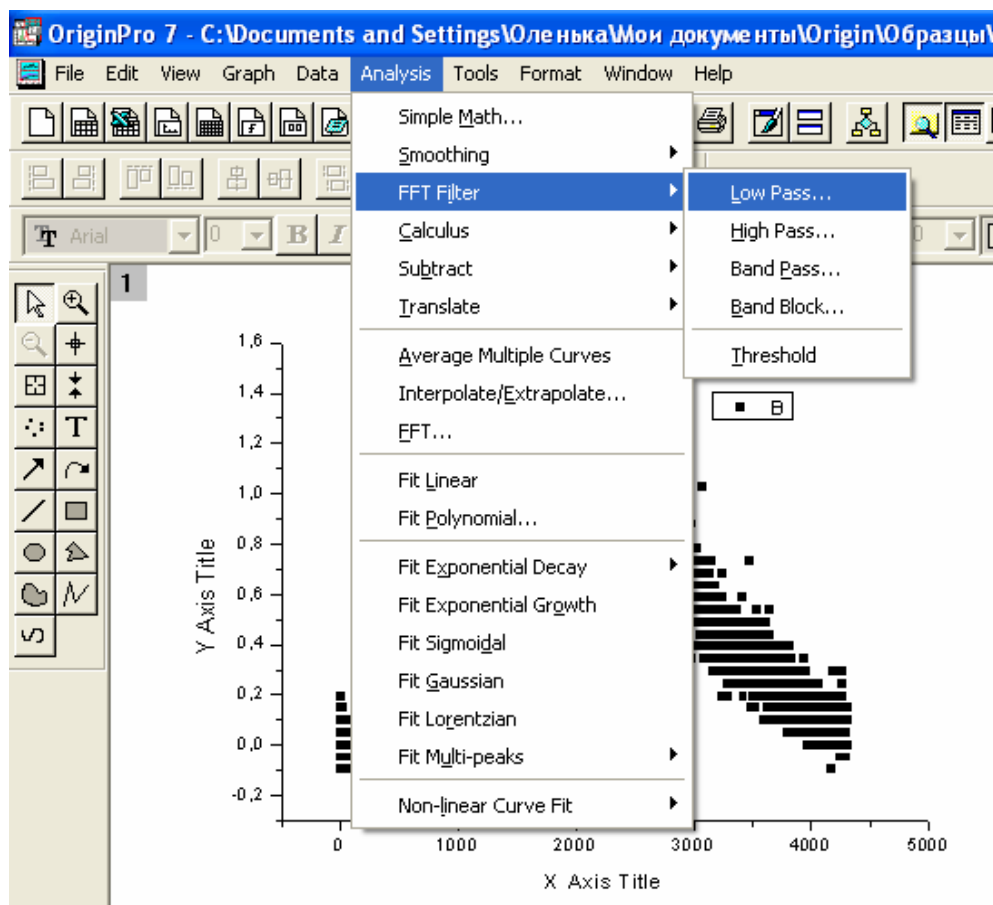


Рис. 5.4. Меню Фурье-фильтрации

⁴ Краткая теория Фурье-фильтрации приведена в приложении.

Появится окно **Frequency Cutoff** (обрезка частоты) (рис. 5.5), в котором можно задать цвет фильтрующей линии, либо согласиться с автоматически предлагаемым цветом, выбрать значение порога; подтвердите действия нажатием кнопки **Ок**. Видно, что характерное время изменения сигнала составляет несколько тысяч секунд ($\tau \approx 4000$), т.е. характерная частота сигнала $\nu = \frac{1}{\tau} \approx 0,25 \cdot 10^{-3}$ Гц. Шум высокочастотный. Следовательно, в результате фильтрации мы должны оставить только низкочастотную составляющую. В качестве порога можно взять величину 0,001, которую по умолчанию предлагает Origin.

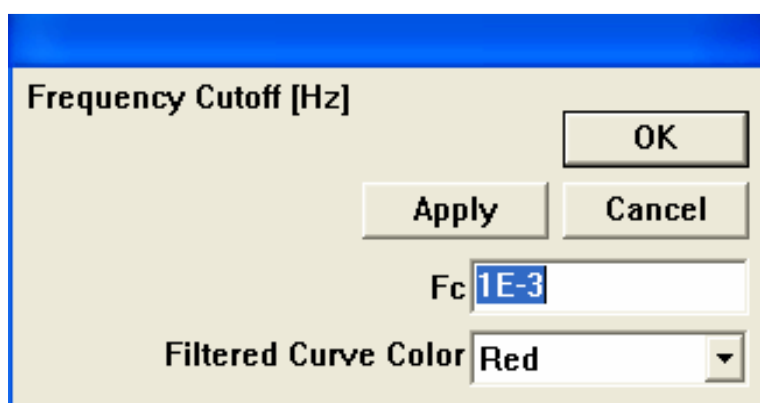


Рис. 5.5. Диалоговое окно Фурье-фильтрации

Отредактированный график выглядит следующим образом (рис.5.6).

Смещая порог фильтрации, можно получить более или менее гладкие кривые. Подбирать величину порога фильтрации нужно исходя из представления о желаемом результате. На рис. 5.7 представлен график, для которого порог фильтрации составляют 0,01. Видно, что кривая менее гладкая.

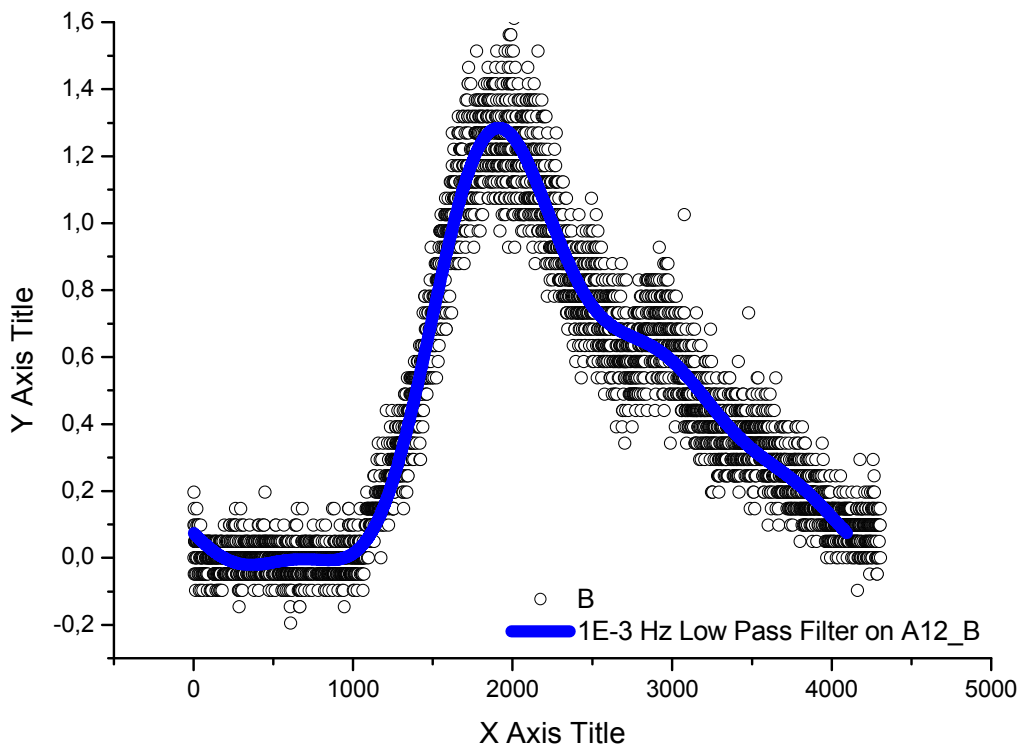


Рис. 5.6. Выделенный с помощью Фурье-фильтрации сигнал (порог 0,001 Гц)

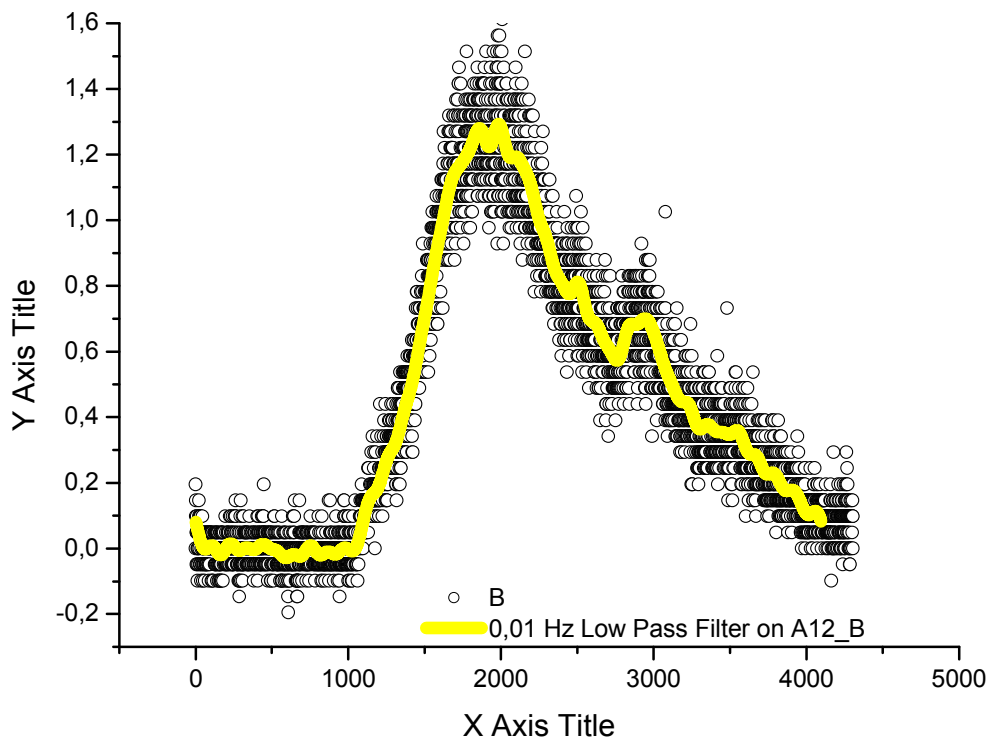


Рис. 5.7. Выделенный с помощью Фурье-фильтрации сигнал (порог 0,001 Гц)

6. Аппроксимация нелинейными функциями

На практике часто бывает необходимо аппроксимировать экспериментальные данные различными нелинейными функциями. Origin имеет богатый набор встроенных функций, часто применяемых в физике. Кроме того, имеется возможность задавать свои собственные функции. В меню имеются несколько пунктов, позволяющих быстро проводить аппроксимацию наиболее часто встречающимися функциями.

Мы познакомимся с нелинейной аппроксимацией на примере компьютерного эксперимента по определению порога перколяции⁵ некоторой системы.

В таблице 6.1 приведена вероятность обнаружения перколяционного кластера в зависимости от доли заполнения системы. Перенесите эти данные в Origin, и постройте по ним график типа **Scatter** (точки). Аппроксимируем эти данные кривой вида

$$P(p) = A_2 - (A_1 - A_2) \left(1 + \exp\left(\frac{p - p_c}{a}\right) \right)^{-1}.$$

Таблица 6.1.

p	P
0,25	0
0,251	0,08
0,252	0,14
0,253	0,22
0,254	0,34
0,255	0,49
0,256	0,59
0,257	0,71
0,258	0,88
0,259	0,97
0,26	0,98
0,261	1

Провести аппроксимацию можно несколькими альтернативными способами. Выбираем пункт меню **Tools/ Sigmoidal Fit** (инструменты/ аппроксимация сигмоидной (S-образной) кривой) (см. рис. 6.1).

⁵ Краткая информация по теории перколяции приведена в приложении.

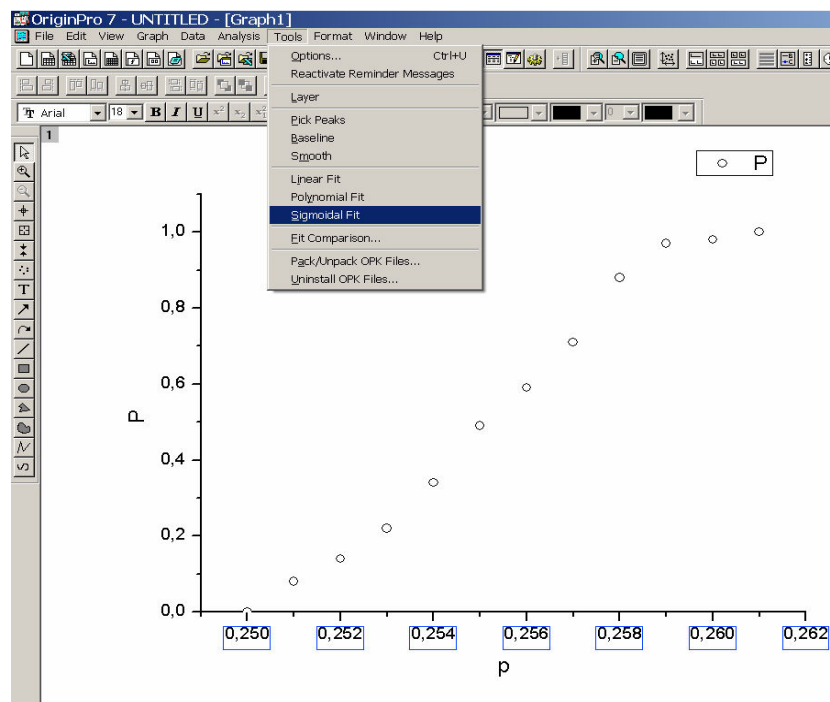


Рис.6.1. Аппроксимация данных сигмоидой

Появится диалоговое окно **Sigmoidal Fit**. На закладке **Settings** (настройки) указываем количество точек, которые будут использоваться для построения графика: **Points** – 1000. В списке функций (**Logged data fit function**) выбираем **Boltzman** (Больцман) (рис. 6.2, а). Переходим на закладку **Operation**. Поскольку в нашей конкретной задаче известны значения горизонтальных асимптот (по смыслу задачи параметр $A_2 = 1$, параметр $A_1 = 0$), указываем эти значения в окошках **Upper** (верхняя) и **Lower** (нижняя), и отмечаем галочками, что эти значения фиксированные (см. рис. 6.2, б). Нажимаем кнопку **Fit**.

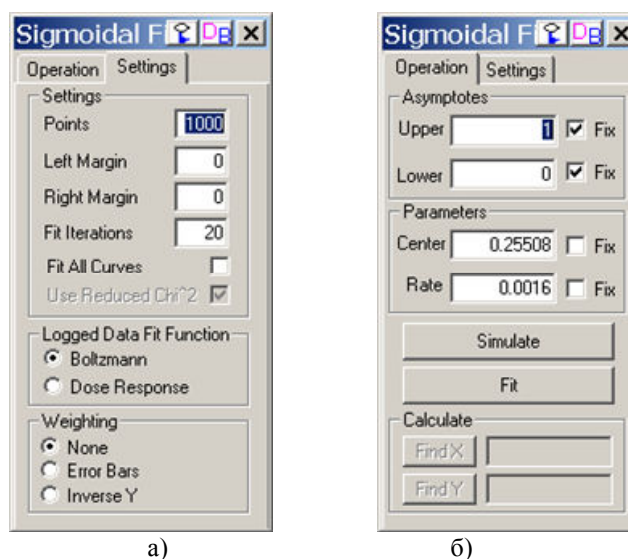


Рис. 6.2. Диалоговое окно для проведения нелинейной аппроксимации

В результате появится аппроксимирующая кривая, представленная на рис. 6.3. Естественно, вам придется выполнить некоторые уже извест-

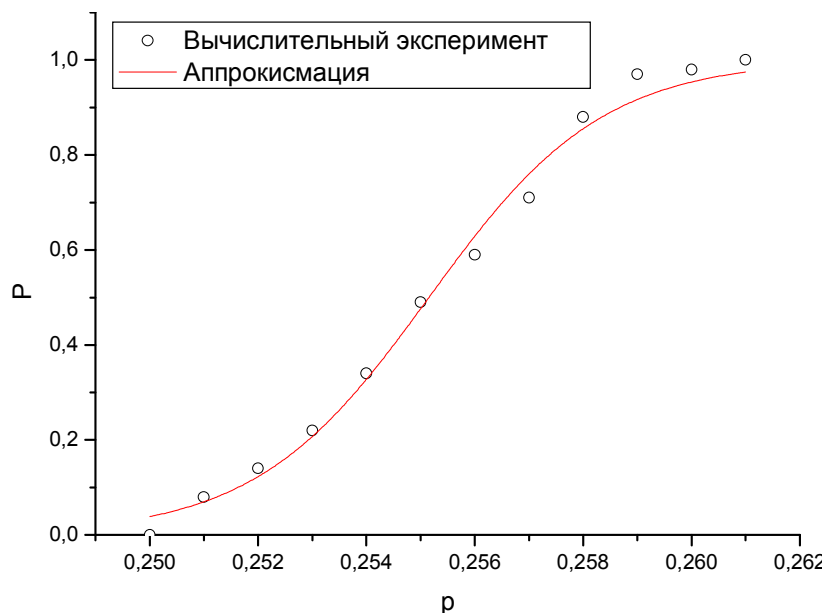


Рис. 6.3. Аппроксимирующая кривая

ные действия по форматированию вашего графика, чтобы его внешний вид совпал с представленным рисунком. Кроме того, будет выведен протокол результатов со значениями найденных параметров и погрешностей.

[11.07.2007 13:18 "/Graph1" (2454292)]

Dose Response Analysis for Data1_C:

Model: Boltzmann

Parameter	Value	Error
Chi ² /DoF	0,00112	
Initial (A1)	0	0
Final (A2)	1	0
EC50 (x0)	0,25515	1,04065E-4
Width (dx)	0,0016	9,36497E-5

Параметр x_0 (в нашем случае это p_c) дает координату точки перегиба. В решаемой нами задаче именно эта величина принимается за оценку порога перколяции.

Как мы уже сказали, описанный метод является только одним из возможных вариантов проведения аппроксимации. Наиболее богатые возможности представляет мастер аппроксимаций NLSF Wizard, который можно вызвать из пункта меню Analysis/Non-linear Curve Fit. На рис. 6.4 представлен один из этапов диалога – выбор аппроксимирующей функции.

Мы специально выбрали ту же самую функцию, чтобы по изображению в диалоговом окне мастера продемонстрировать смысл параметров функции.

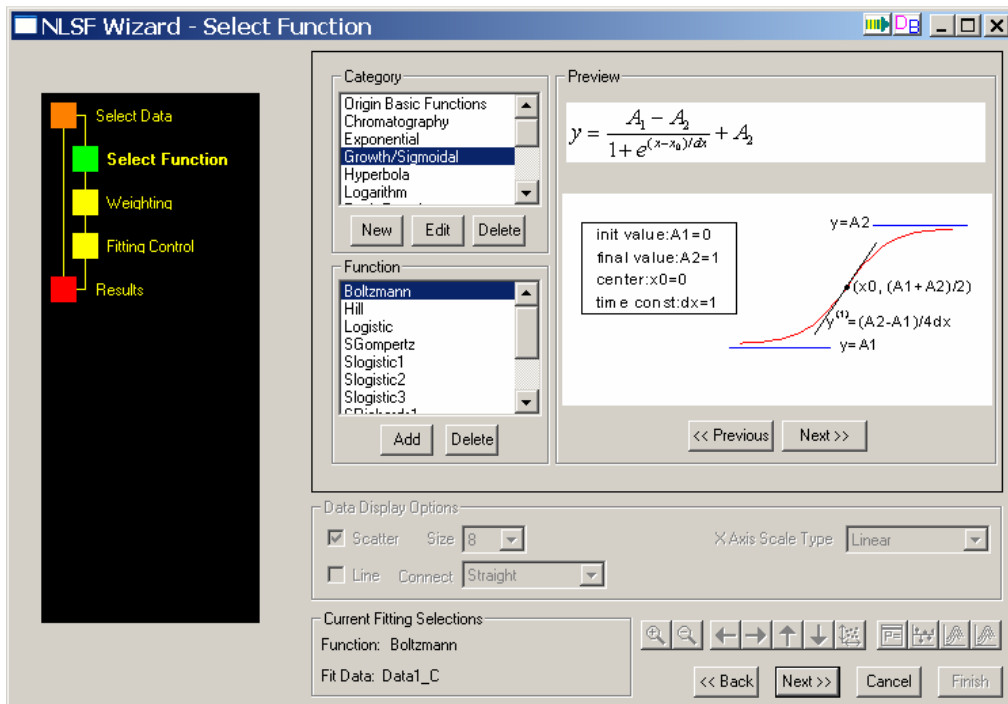


Рис. 6.4. Выбор аппроксимирующей функции с помощью мастера аппроксимаций NLSF Wizard

Упражнение

Обработайте приводимые данные компьютерного эксперимента по определению порога перколяции некоторой системы.

Линейный размер системы	Свободные граничные условия		Периодические граничные условия	
	$p_c(L)$	Error	$p_c(L)$	Error
L				
32	0,25845	5,5E-4	0,25297	1,95829E-4
64	0,2568	2E-4	0,2544	1,25419E-4
128	0,25612	1E-4	0,25506	7,645E-5

1. Постройте график зависимости $p_c(L)$ как функции $L^{-\frac{1}{\nu}}$ ($\nu = 0,875$) с указанием на графике величины погрешности для системы со свободными граничными условиями.
2. Проведите аппроксимацию данных по методу наименьших квадратов, используя погрешности в качестве весов.
3. Определите порог перколяции в термодинамическом пределе как точку пересечения графика с осью ординат. Необходимое значение возьмите из протокола результатов.
4. Добавьте на график второй слой.
5. На втором слое построьте график зависимости $p_c(L)$ как функции $L^{-\frac{1}{\nu}}$ ($\nu = 0,875$) с указанием на графике величины погрешности для системы с периодическими граничными условиями.
6. Проведите аппроксимацию данных по методу наименьших квадратов, используя погрешности в качестве весов.
7. Определите порог перколяции в термодинамическом пределе как точку пересечения графика с осью ординат. Необходимое значение возьмите из протокола результатов.
8. Результаты обработки сравните с приводимыми ниже протоколами.
9. Оформите график так, как показано на рис. 1.

[14.04.2007 15:10 "/Graph1" (2454204)]

Linear Regression for svobodn_B:

$Y = A + B * X$

Weight given by svobodn_D error bars.

Parameter	Value	Error
A	0,25553	1,8069E-4
B	0,15029	0,03023

R	SD	N	P
0,99942	0,16994	3	0,02175

[14.04.2007 15:11 "/Graph1" (2454204)]

Linear Regression for period_B:

$$Y = A + B * X$$

Weight given by period_D error bars.

Parameter	Value	Error
A	0,2556	1,07824E-4
B	-0,13824	0,01343

R	SD	N	P
-0,99998	0,05729	3	0,00354

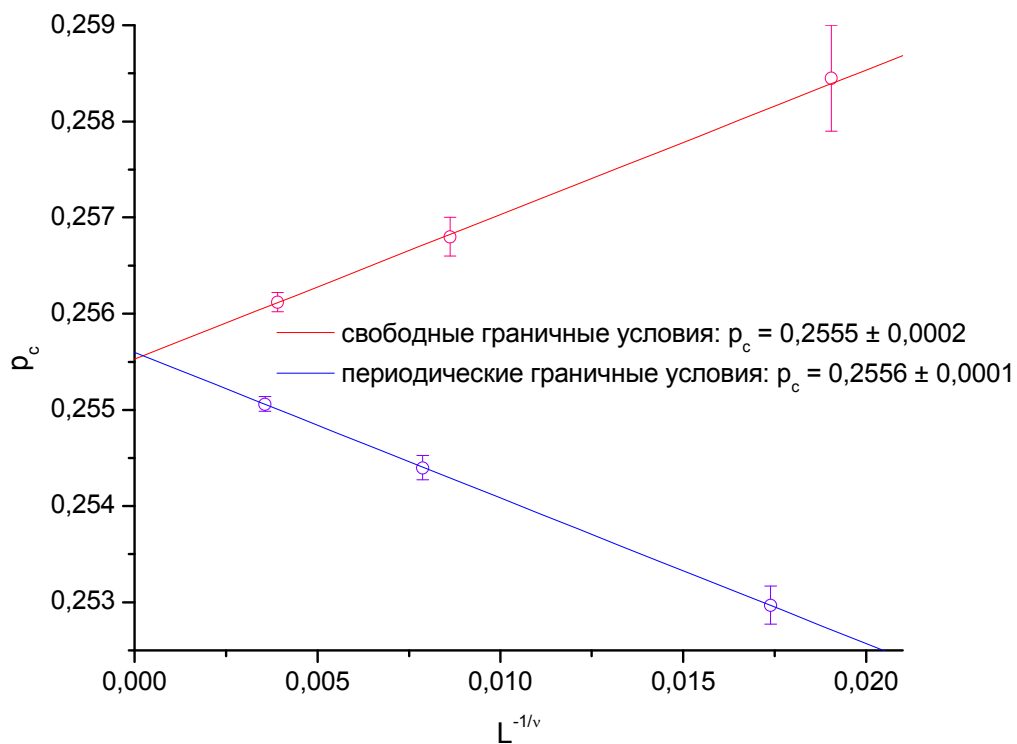


Рис.1.

Приложение

Метод наименьших квадратов

Наиболее распространенным методом аппроксимации экспериментальных данных является метод наименьших квадратов. В методе наименьших квадратов требуют, чтобы сумма квадратов отклонений от аппроксимирующей функции до экспериментальных точек была минимальной: $\Phi = \sum_{i=1}^n (f(x_i) - y_i)^2 \rightarrow \min$. Здесь $\{x_i, y_i\}$ – координаты экспериментальных точек, $f(x)$ – аппроксимирующая функция, n – число экспериментальных точек.

Таким образом, не требуется, чтобы аппроксимирующая функция проходила через все заданные точки, как в случае интерполяции, что особенно важно при аппроксимации данных, заведомо содержащих погрешности.

Важной особенностью метода является то, что аппроксимирующая функция может быть произвольной. Ее вид определяется особенностями решаемой задачи, например, физическими соображениями, если проводится аппроксимация результатов физического эксперимента.

Простейшим вариантом метода наименьших квадратов является аппроксимация прямой линией. Кроме того, часто бывает возможно путем замены переменных свести задачу к линейной (провести линеаризацию).

Если точность определения экспериментальных данных различна для различных точек, то можно использовать погрешности в качестве весов, т.е. потребовать, чтобы аппроксимирующая функция проходила как можно ближе к экспериментальным точкам с малой погрешностью измерения и не слишком далеко от точек с высокой погрешностью измерения.

В общем случае для нахождения аппроксимирующей функции по методу наименьших квадратов требуется решить задачу нелинейной оптимизации. Однако в случае аппроксимации прямой линией все выкладки можно провести вручную и получить формулы для коэффициентов прямой.

Будем искать аппроксимирующую функцию в виде полинома первой степени: $f(x) = ax + b$. Задача состоит в определении неизвестных коэффициентов a и b . Таким образом, мы ищем такие значения параметров a и b , при которых функция $\Phi(a, b) = \sum_{i=1}^n (ax_i + b - y_i)^2$ будет минимальной. Как

известно, это значит, что $\frac{\partial \Phi}{\partial a} = 2 \sum_{i=1}^n (ax_i + b - y_i)x_i = 0$ и

$\frac{\partial \Phi}{\partial b} = 2 \sum_{i=1}^n (ax_i + b - y_i) = 0$. Отсюда получаем систему линейных уравнений

$$a \sum_{i=1}^n x_i^2 + b \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n x_i y_i$$

$$a \sum_{i=1}^n x_i + bn = \sum_{i=1}^n y_i$$

Решая полученную систему, находим значения коэффициентов прямой

$$a = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{\Delta}$$

$$b = \frac{\sum_{i=1}^n x_i^2 \sum_{i=1}^n y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n x_i y_i}{\Delta}$$

$$\Delta = n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2$$

Аналогично можно получить формулы для случая, когда различные экспериментальные точки входят с различными весами. В качестве веса обычно используют величину обратную дисперсии. Для произвольной аппроксимирующей функции нахождение неизвестных коэффициентов представляет достаточно сложную задачу и, как правило, проводится на компьютере.

Фурье-фильтрация

На практике часто встречается ситуация, когда на некоторый сигнал накладывается шум. Возникает задача отделения сигнала от шума. Эту задачу можно решить с помощью Фурье-фильтрации.

С основной идеей Фурье-фильтрации познакомимся на простейшем примере. Пусть имеется основной сигнал $signal(t) = \sin 2\pi t$, на который накладывается случайный шум $noise(t)$, изменяющийся в диапазоне $[-0,5; 0,5]$

Проведем численное преобразование Фурье суммарного сигнала $f(t) = signal(t) + noise(t)$. Будем полагать, что функция $f(t)$ известна на

промежутке $0 \leq t < L$ ($L=5$) в дискретной системе точек $t_k = \frac{kL}{N}$, где $k = 0, 1, \dots, N-1$. Тогда функцию $f(t)$ можно приближенно представить в виде тригонометрического многочлена $f(t) \approx \sum_{l=0}^{N-1} c_l \exp\left(\frac{2\pi i l}{L} t\right)$, где $c_l = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} f(t_j) \exp\left(-\frac{2\pi i l j}{N}\right)$. Величины $\Omega_l = \frac{2\pi l}{L}$ являются частотами гармоник, формирующих сложный сигнал; комплексные коэффициенты c_l – амплитуды этих гармоник.

В спектре присутствует только одна частота с большой амплитудой, которая соответствует сигналу, и множество гармоник с малой амплитудой, соответствующие шуму (рис. 2).

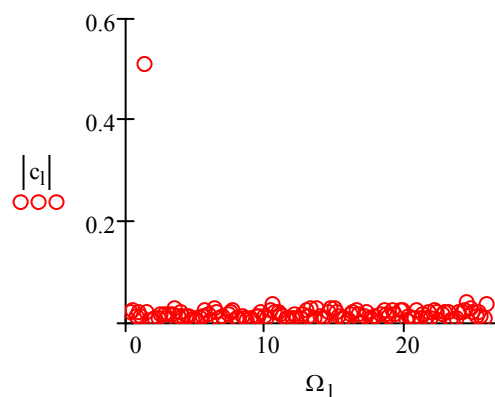


Рис. 2 Спектральный состав сигнала

Проведем обратное преобразование Фурье, отбросив все гармоники, имеющие амплитуду менее 0,4. (Порог в каждом конкретном случае зависит от существа решаемой задачи.) В результате будет получена функция, не содержащая шума (рис. 3).

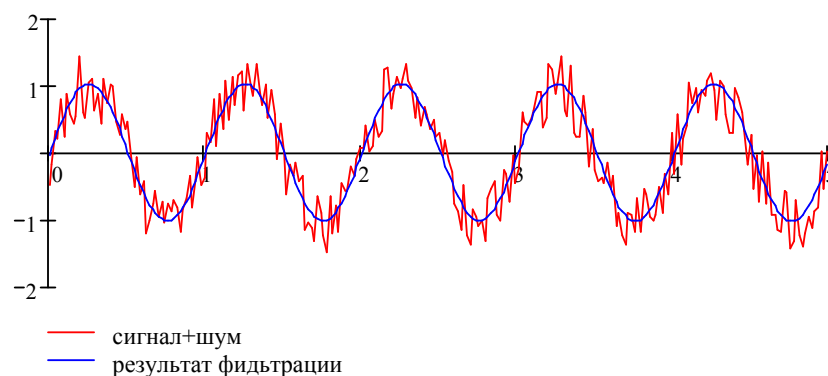


Рис.3 Результат Фурье-фильтрация зашумленного сигнала

Элементарные сведения по теории перколяции

Слово «перколяция» (percolation – англ.) означает протекание. Название возникло в связи с тем, что ряд первых работ в этом направлении был посвящен процессам протекания жидкостей или газов через пористую среду. До сих пор эта тематика занимает существенную часть в работах по теории перколяции.

Теория перколяции занимается изучением свойств неупорядоченных систем. Ее интересует образование связанных объектов внутри неупорядоченной среды.

Перколяция является критическим явлением. Это чисто геометрический фазовый переход, тесно связанный с обычными фазовыми переходами второго порядка. Теория перколяции является очень простым, но универсальным, мощным и полезным инструментом. Теория привлекает внимание исследователей (математиков, программистов, физиков, инженеров) по различным причинам от чисто теоретических до прикладных, поскольку успешно применяется для решения широкого круга задач в разнообразных областях. Она позволяет описать процессы самой разной природы, когда при плавном изменении одного из параметров системы (концентрации чего-то) свойства системы меняются скачком. Теория перколяции используется для описания фазовых переходов металл–изолятор, парамагнетик–ферромагнетик, золь–гель, процессов полимеризации, для моделирования процесса распространения эпидемий и т.д.

Пусть, некоторая система заполняется случайным образом объектами с заданной концентрацией. Объекты могут связываться друг с другом, образуя кластер (cluster – англ. – гроздь). При определенной концентрации объектов возможно появление кластера, пронизывающего всю систему. При возникновении такого кластера свойства системы меняются, происходит фазовый переход.

Один из возможных типов перколяционных задач и вместе с тем наиболее часто используемый и простейший – перколяция узлов. В общем, перколяция узлов определяется на решетке (графе) в d -мерном пространстве, где каждый узел (вершина) может быть занят с вероятностью p или свободен с вероятностью $1 - p$. Соседние занятые решетки образуют кластер. Если кластер столь велик, что достигает противоположных сторон системы, то он называется перколяционным. Очевидно, что для решетки конечного размера перколяционные кластеры могут возникать при разных концентрациях. Однако в термодинамическом пределе, если размер системы устремить к бесконечности, критическая концентрация станет вполне определенной. Это строго доказано. Такую критическую концентрацию называют порог перколяции.

Решеточные модели в первую очередь представляют интерес с теоретической точки зрения, именно для них доказан ряд строгих утверждений и соотношений. К настоящему времени процессы протекания на решетках изучены и поняты достаточно хорошо.

В отличие от теории температурных фазовых переходов, где переход между двумя фазами происходит при критической температуре, перколяционный переход является геометрическим фазовым переходом. Порог перколяции или критическая концентрация разделяет две фазы: в одной фазе имеются только кластеры конечного размера, в другой существует один бесконечный кластер. Таким образом, в перколяции концентрация занятых узлов играет ту же роль, что и температура в температурных фазовых переходах. Вероятность, что узел принадлежит бесконечному кластеру, аналогична параметру порядка в теории температурных фазовых переходов.

Большинство результатов теории перколяции получено в результате компьютерного моделирования. Если построить зависимость вероятности возникновения перколяционного кластера в данной системе $P(p)$ от концентрации занятых узлов, то точка, соответствующая вероятности 50%, является оценкой порога перколяции $p_c(L)$ для системы данного размера L . Полученное при моделировании значение порога должно быть экстраполировано на случай термодинамического предела с помощью скейлингового соотношения $|p_c(L) - p_c(\infty)| \propto L^{-\frac{1}{\nu}}$, где ν – универсальный критический показатель, зависящий только от размерности пространства.