



WESTFÄLISCHE
WILHELMS-UNIVERSITÄT
MÜNSTER

Origin 8.5 Einführung

Präsentation zu finden unter:

<http://www.uni-muenster.de/Chemie.pc/studieren/PC-II-Praktikum.html>

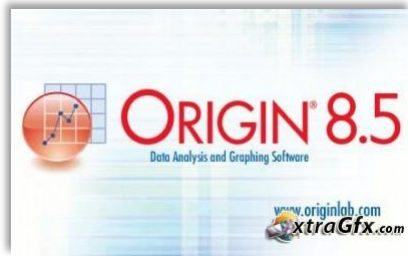
oder:

[uni-muenster.de](http://www.uni-muenster.de) → Schönhoff → Studieren → PC II (5. FS) → Origin Einführungskurs

wissen.leben
WWU Münster

Jonas Fuchs

AK Schönhoff
Büro E139
Tel.: (83) 23415
j_fucho5@uni-muenster.de



vs.





✓ Kalenderstart



- Start des Kalenders:
01.01.-4712

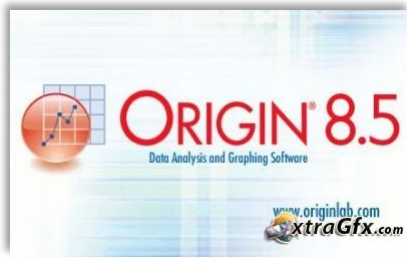
	A(X)	B(Y)
Langname		
Einheiten		
Kommentare		
1	28.01.1300	
2	29.01.1300	
3	30.01.1300	
4	31.01.1300	
5	01.02.1300	
6	02.02.1300	
7	03.02.1300	
8	04.02.1300	
9	05.02.1300	
10	06.02.1300	
11	07.02.1300	
12	--	--
13	--	--

- Start des Kalenders:
01.01.1900

	A	B	C	D
1	Datum normal		Datum ???	
2	01.01.1900		01.01.1899	
3	02.01.1900		01.01.1900	
4	03.01.1900		01.01.1901	
5	04.01.1900		01.01.1902	
6	05.01.1900		01.01.1903	
7	06.01.1900		01.01.1904	
8	07.01.1900		01.01.1905	
9	08.01.1900		01.01.1906	
10				
11				
12				01.01.1907

Datum

Zahl



- ✓ Kalenderstart
- ✓ Objekte einfügen

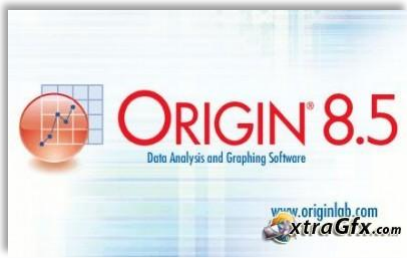


- Erlaubt Einfügen von:
 - Bilder
 - Diagramme
 - Sparklines
 - Notizen
- in beliebige Arbeitsblattzelle

- Objekte liegen über dem Arbeitsblatt

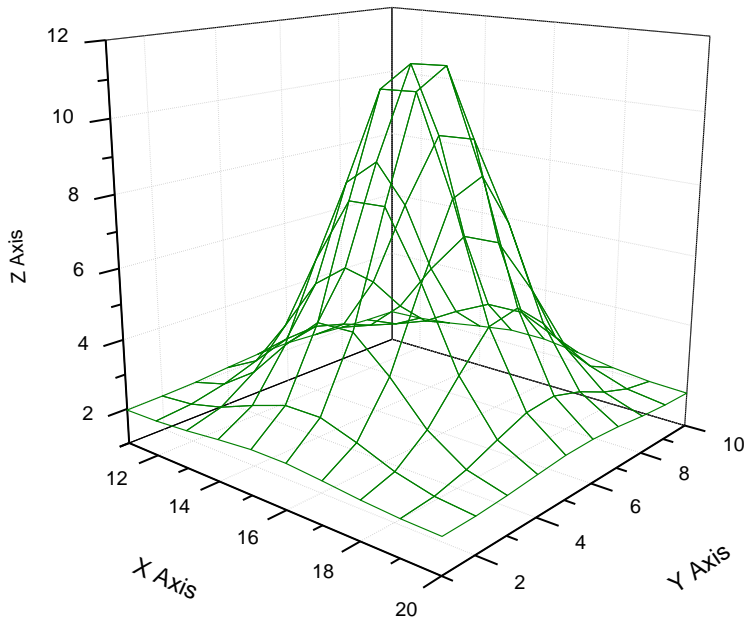
Kommentare			
1			
2			
3		😊	
4			--
5	😊		--
6	--		--
7	--	😊	
8	--	😊	
9	--		
10	😊		
11			

Zwischentabelle 3		Seite 3	
Grafik 3			
	A	B	
1			
2	😞		
3		🤖	
4		😞	
5	😞		
6			
7			
8			

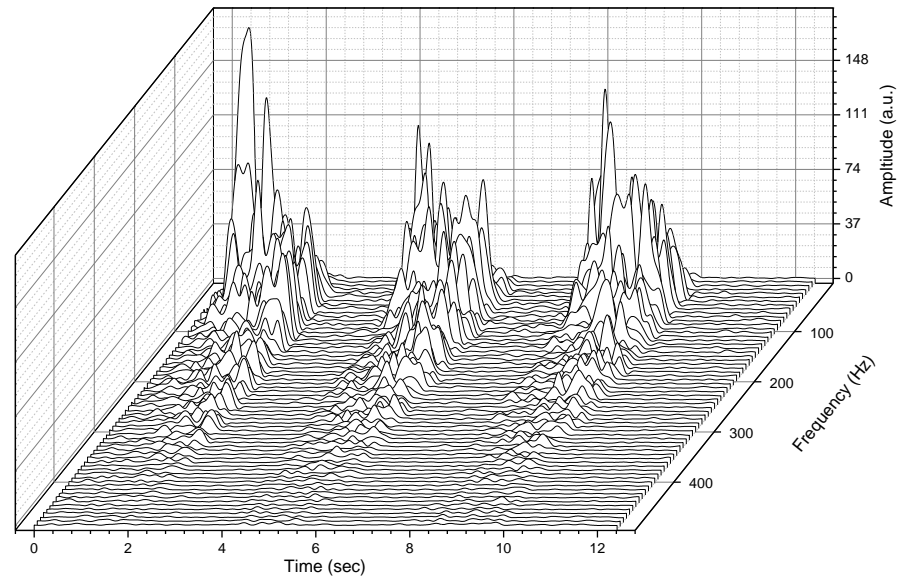


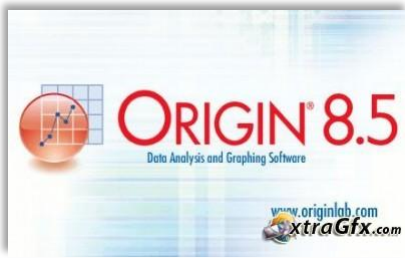
- ✓ Kalenderstart
- ✓ Objekte einfügen
- ✓ 3D xyz-Diagramme

Oberflächendiagramm:



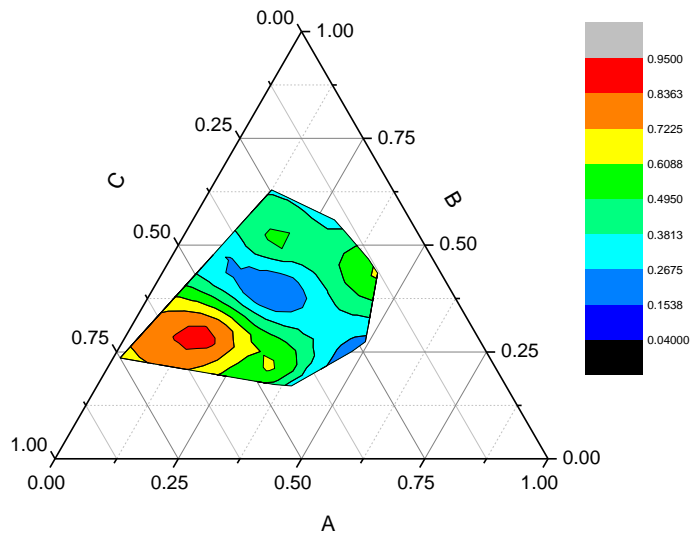
Wasserfalldiagramm:



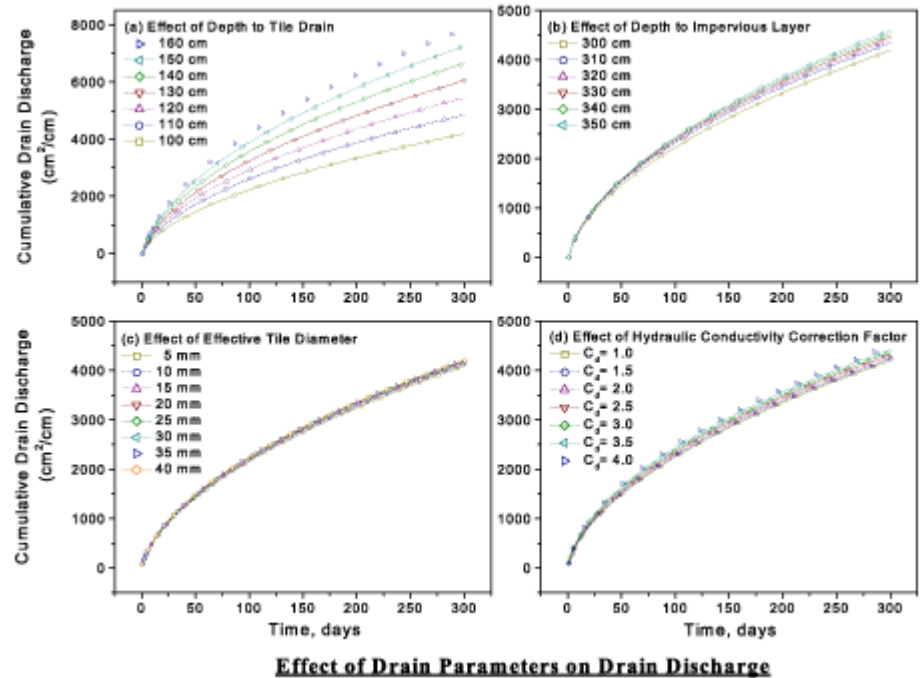


- ✓ Kalenderstart
- ✓ Objekte einfügen
- ✓ 3D xyz-Diagramme
- ✓ Ternäres Konturdiagramm
- ✓ Mehrfachdiagramm

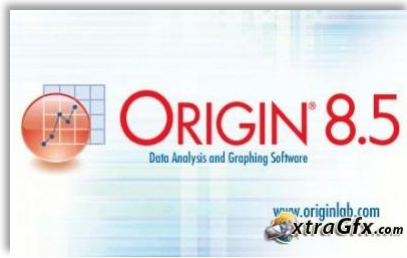
Ternäres Konturdiagramm:



Mehrfachdiagramm:

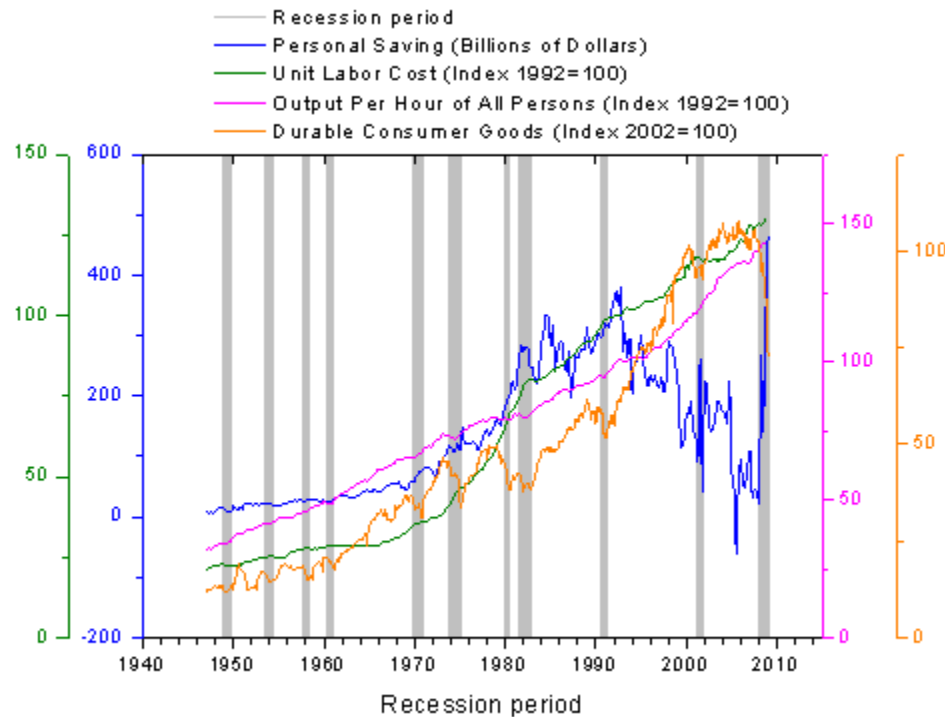


Quelle: <http://www.originlab.de/index.aspx?go=Products/Origin&pid=926>

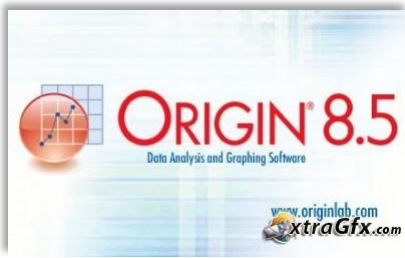


- ✓ Kalenderstart
- ✓ Objekte einfügen
- ✓ 3D xyz-Diagramme
- ✓ Ternäres Konturdiagramm
- ✓ Mehrfachdiagramm
- ✓ zusätzliche Achsen
- ✓ fehlende Werte

Diagramm mit mehreren Achsen, Verarbeitung von Daten mit fehlenden Werten:

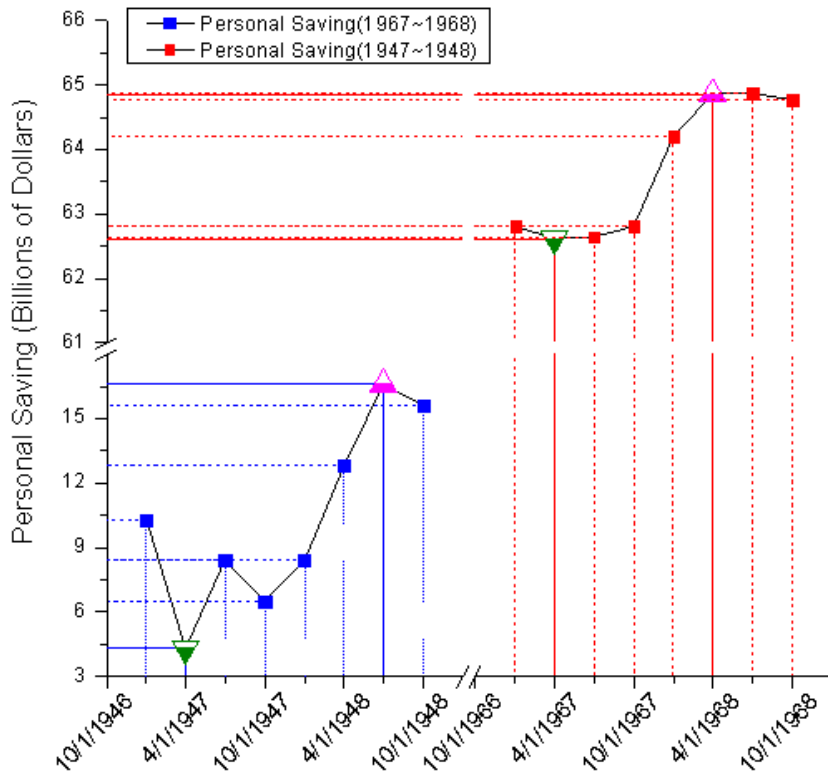


Quelle: <http://www.originlab.de/index.aspx?go=Products/Origin&pid=926>

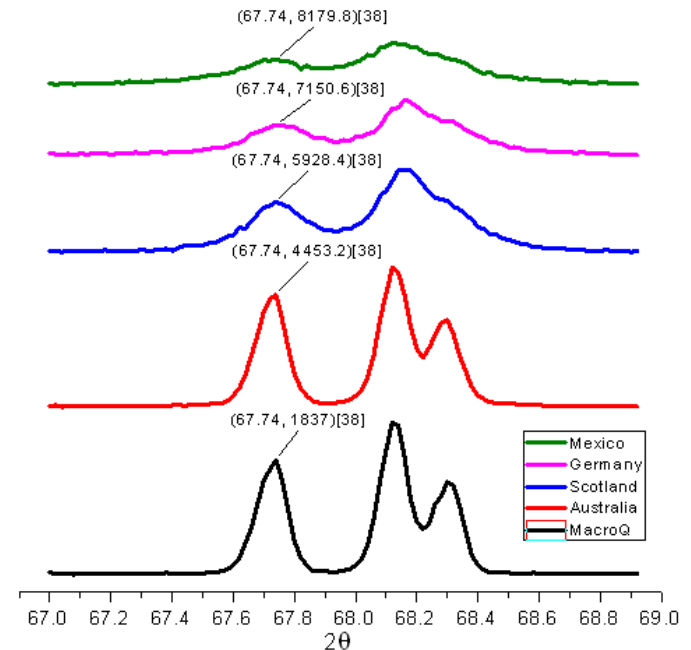


- ✓ Kalenderstart
 - ✓ Objekte einfügen
 - ✓ 3D xyz-Diagramme
 - ✓ Ternäres Konturdiagramm
 - ✓ Mehrfachdiagramm
 - ✓ zusätzliche Achsen
 - ✓ fehlende Werte
- ✓ Achsenunterbrechungen
 - ✓ Ankerlinien
 - ✓ gestapelt + y-Versatz

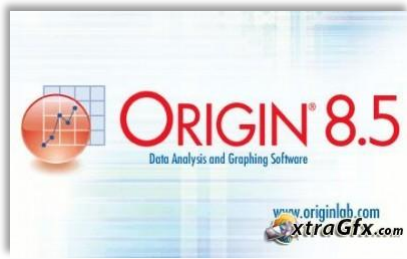
Achsenunterbrechungen, Ankerlinien:



gestapelte Liniendiagramme mit y-Versatz:

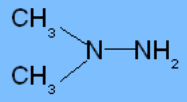
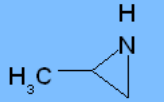
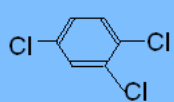
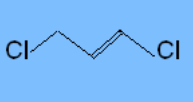

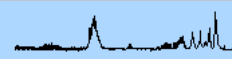




Quelle: <http://www.originlab.de/index.aspx?go=Products/Origin&pid=926>

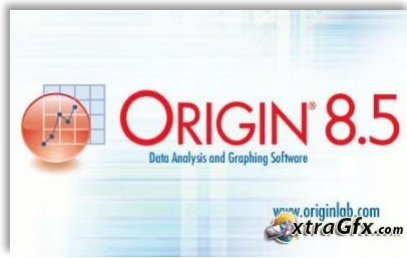


- ✓ Kalenderstart
- ✓ Objekte einfügen
- ✓ 3D xyz-Diagramme
- ✓ Ternäres Konturdiagramm
- ✓ Mehrfachdiagramm
- ✓ zusätzliche Achsen
- ✓ fehlende Werte
- ✓ Achsenunterbrechungen
- ✓ Ankerlinien
- ✓ gestapelt + y-Versatz
- ✓ Organisation

Bessere Organisation der Daten

	A(Y)	B(Y)	C(Y)	D(Y)
CAS Reg. No.	57-14-7	75-55-8	120-82-1	542-75-6
Compound	1,1-Dimethyl hydrazine	1,2-Propylenimine	1,2,4-Trichlorobenzene	1,3-Dichloropropene
Formula	$C_2H_8N_2$	C_3H_7N	$C_6H_3Cl_3$	$C_3H_4Cl_2$
Structure				
PathLength (m)	2.25	2.25	2.25	2.25
Temp (Deg C)	100	100	100	100
Concentration (ppm)	494.1	500.4	498.4	500.6
Resolution (cm-1)	0.25	0.25	0.25	0.25
Sparklines				
Data Source	066b4anb.spc	144b4ana.spc	158b4anc.spc	056b4anb.spc
Comments	A clear, colorless, flammable,	A fuming, colorless, oily liquid wit	A colorless liquid with an aromati	A flammable liquid with faint
1	0.01298	-1.44977E-4	-0.01046	0.0463
2	0.0193	-8.23623E-5	-0.01351	0.04854
3	0.02159	-0.00398	-0.01755	0.04777
4	0.01576	0.00201	-0.01179	0.04738
5	0.01918	-0.00392	-0.01734	0.04385
6	0.01614	-0.00459	-0.01495	0.04713
7	0.01752	-0.00442	-0.01841	0.04599
8	0.01499	-0.00843	-0.01525	0.04548
9	0.01717	-0.00143	-0.01173	0.04543
10	0.00949	-0.00784	-0.01546	0.05075

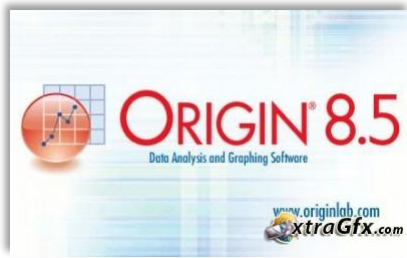
Quelle: <http://www.originlab.de/index.aspx?go=Products/Origin&pid=926>



- ✓ Kalenderstart
- ✓ Objekte einfügen
- ✓ 3D xyz-Diagramme
- ✓ Ternäres Konturdiagramm
- ✓ Mehrfachdiagramm
- ✓ zusätzliche Achsen
- ✓ fehlende Werte
- ✓ Achsenunterbrechungen
- ✓ Ankerlinien
- ✓ gestapelt + y-Versatz
- ✓ Organisation
- ✓ ausführliche Datenanalyse

Datenanalyse:

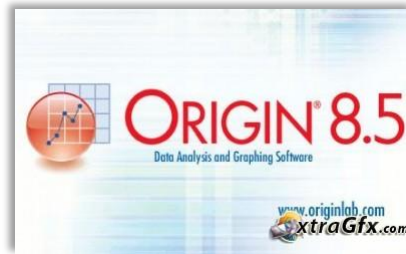
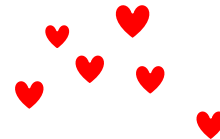
- Maskierung von Datenpunkten
(Ausreißer, Hintergrundrauschen)
- nichtlineare Kurvenanpassung
- Basislinien- und Impulsanpassung
- Signalverarbeitung
(Fouriertransformation, Signal-Dezimierung, umhüllende Kurven, Anstiegszeitanalyse, Hilberttransformation ...)
- mathematische und statistische Berechnungen
- benutzerdefinierte Datenanalyse



- ✓ Kalenderstart
- ✓ Objekte einfügen
- ✓ 3D xyz-Diagramme
- ✓ Ternäres Konturdiagramm
- ✓ Merhfachdiagramm
- ✓ zusätzliche Achsen
- ✓ fehlende Werte
- ✓ Achsenunterbrechungen
- ✓ Ankerlinien
- ✓ gestapelt + y-Versatz
- ✓ Organisation
- ✓ ausführliche Datenanalyse
- ✓ Excel Arbeitsblatt

Exceldokumente können in Origin eingelesen werden bzw. Excel ist in Origin integriert.

→ Je nach Belieben können Daten in Excel bearbeitet und in Origin ausgewertet werden.



Allgemeines über Origin 8.5

Allgemeines

Origin nutzt das in Windows eingestellte Zahlenformat

→ Zahlenformat der Achsenbeschriftung lässt sich in Origin nicht ändern

DIN 1333

78 546,35 €

78.546,35 €

ISO 31

78 546,35 €

CGPM 22nd, 10

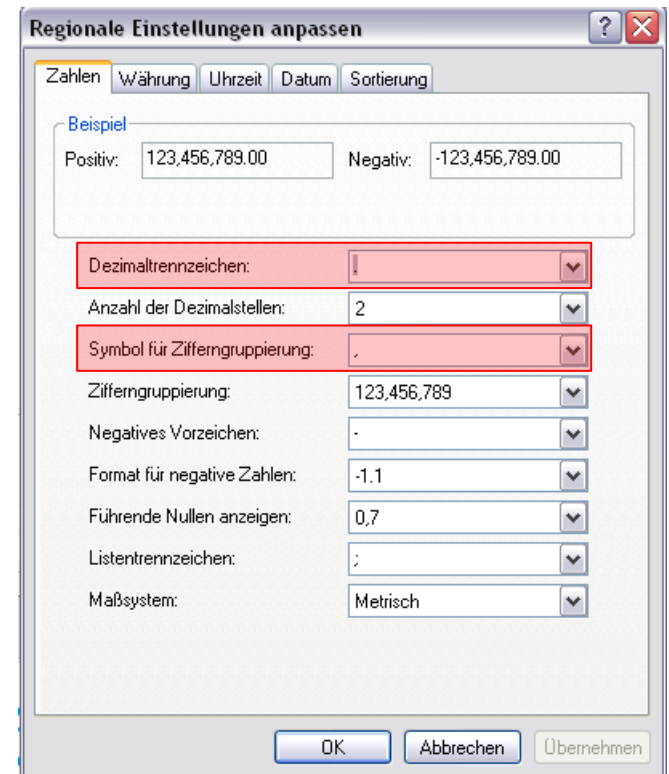
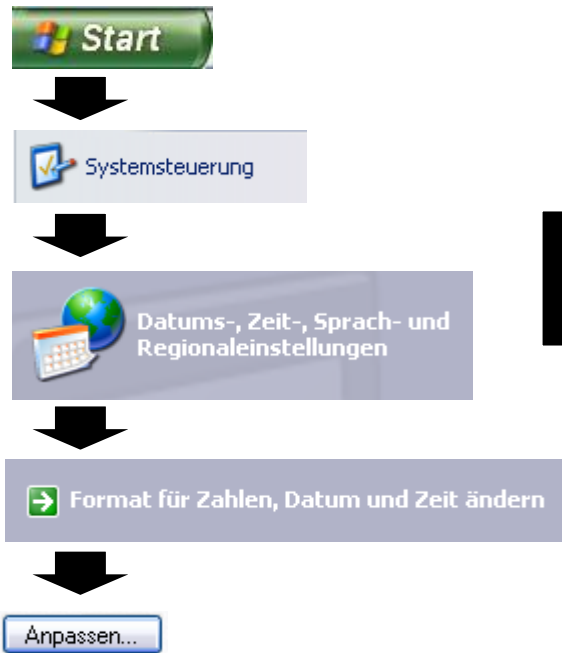
78 546,35 €

(französisch)

78 546.35 €

(britisch)

Wird in englischsprachiger Literatur hauptsächlich genutzt!



Allgemeines

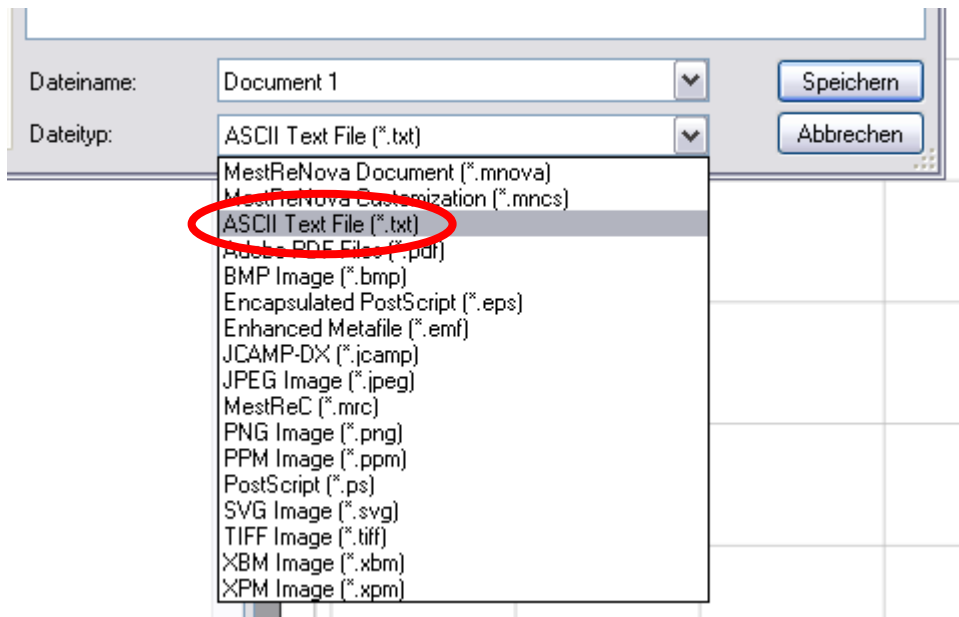
Für den Import von Daten in Origin eignen sich Dateien mit einer 7-Bit-Zeichenkodierung

→ ASCII

American Standard Code for Information Interchange

Dateien im ASCII-Format können unterschiedliche Endungen haben wie z.B.:

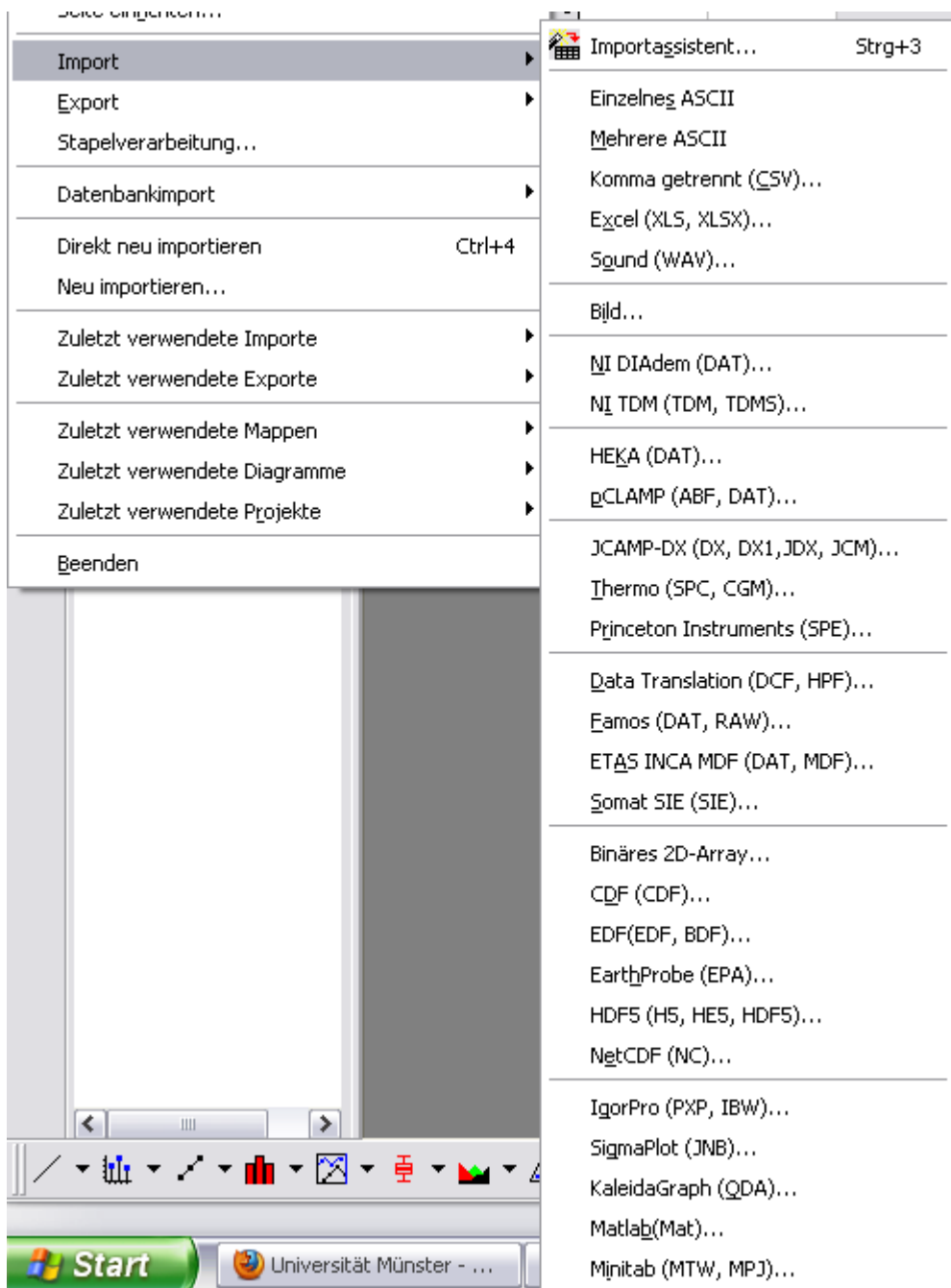
.asc, .dat, .csv oder .txt



Dazu beim Speichern in dem Programm, aus dem exportiert werden soll, ASCII als Dateityp auswählen

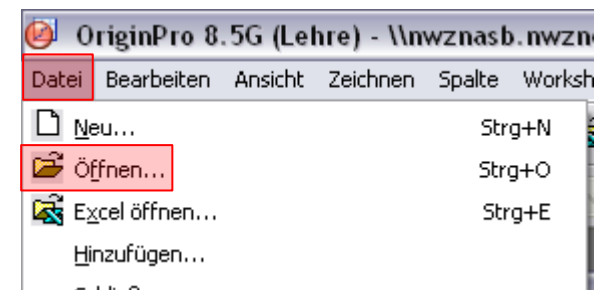
oder, falls möglich:

→ Scripts → Export ASCII



Dateien können auch einfach in Origin geöffnet werden (ohne Importassistent)

→ Datei (Menüzeile) → Öffnen



Allgemeines

DIN 461: Achsenbeschriftung

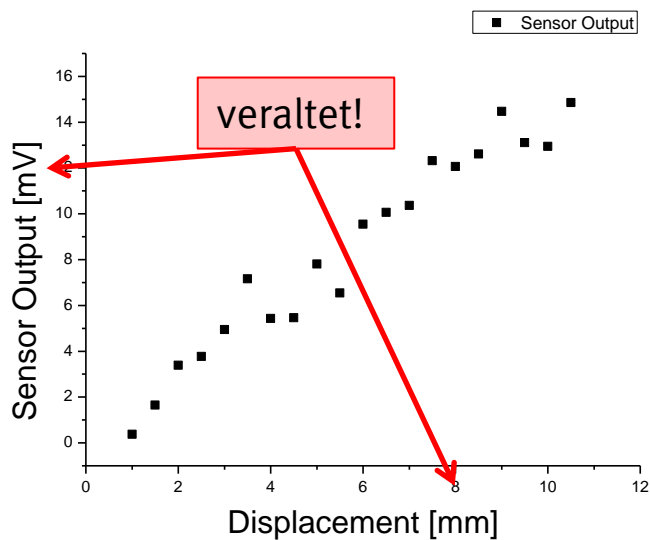
Die Einheit wird in der Achsenbeschriftung wie eine mathematische Größe behandelt.

Beispiel: Achsenbeschriftung: Druck p / bar
abgelesener Zahlenwert auf der Achse: 2.7
→ $p / \text{bar} = 2.7$
→ $p = 2.7 \text{ bar}$

Allgemeines

Origin fügt die Einheiten automatisch in Graphen ein, allerdings in eckigen Klammern.

→ nicht korrekt (alte Schreibweise)



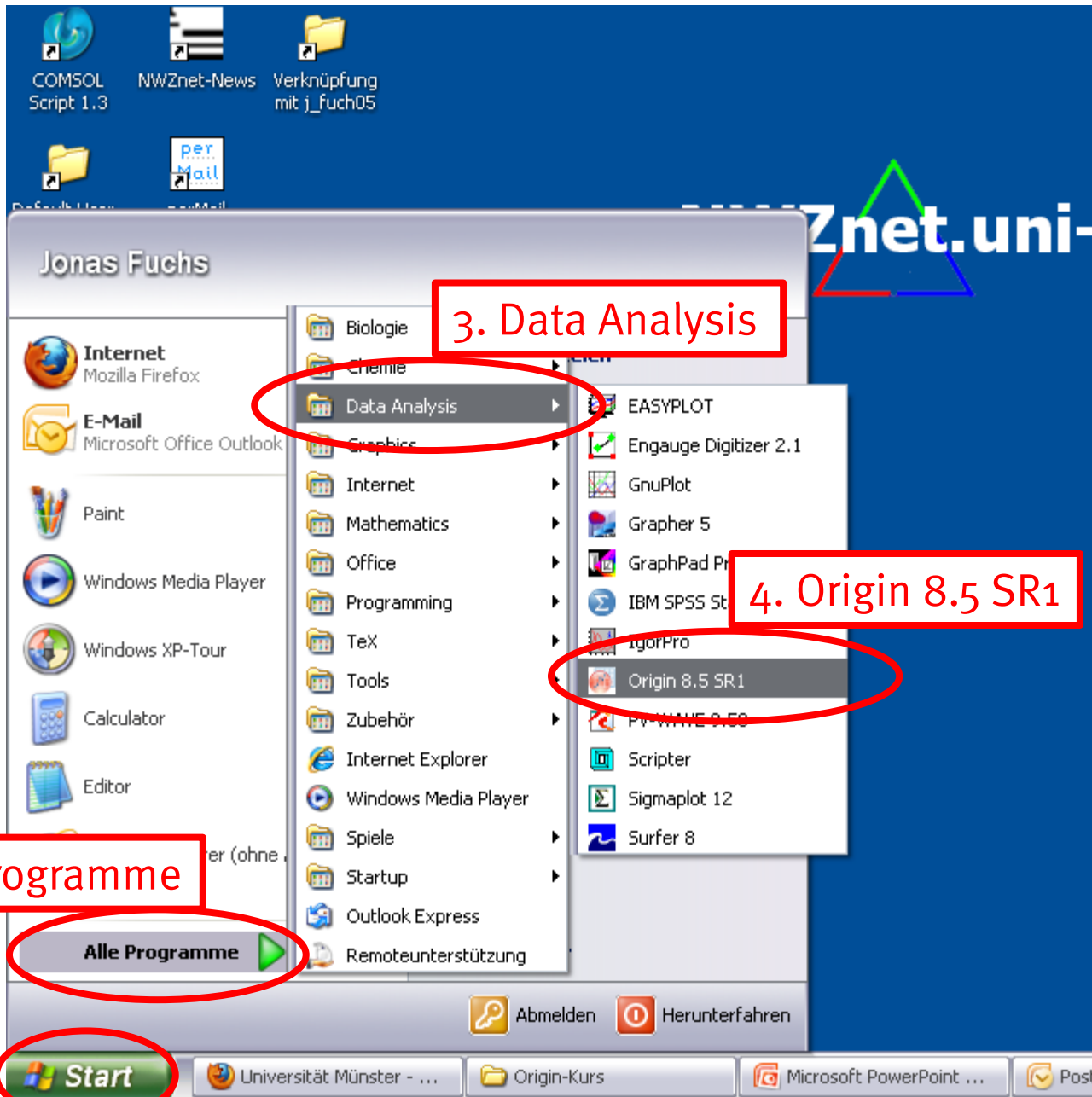
G = physikalische Größe (z.B. Spannung U)
 $\{G\}$ = Zahlenwert $\rightarrow \{U\} = 230$
 $[G]$ = Einheit $\rightarrow [U]_{SI} = V$

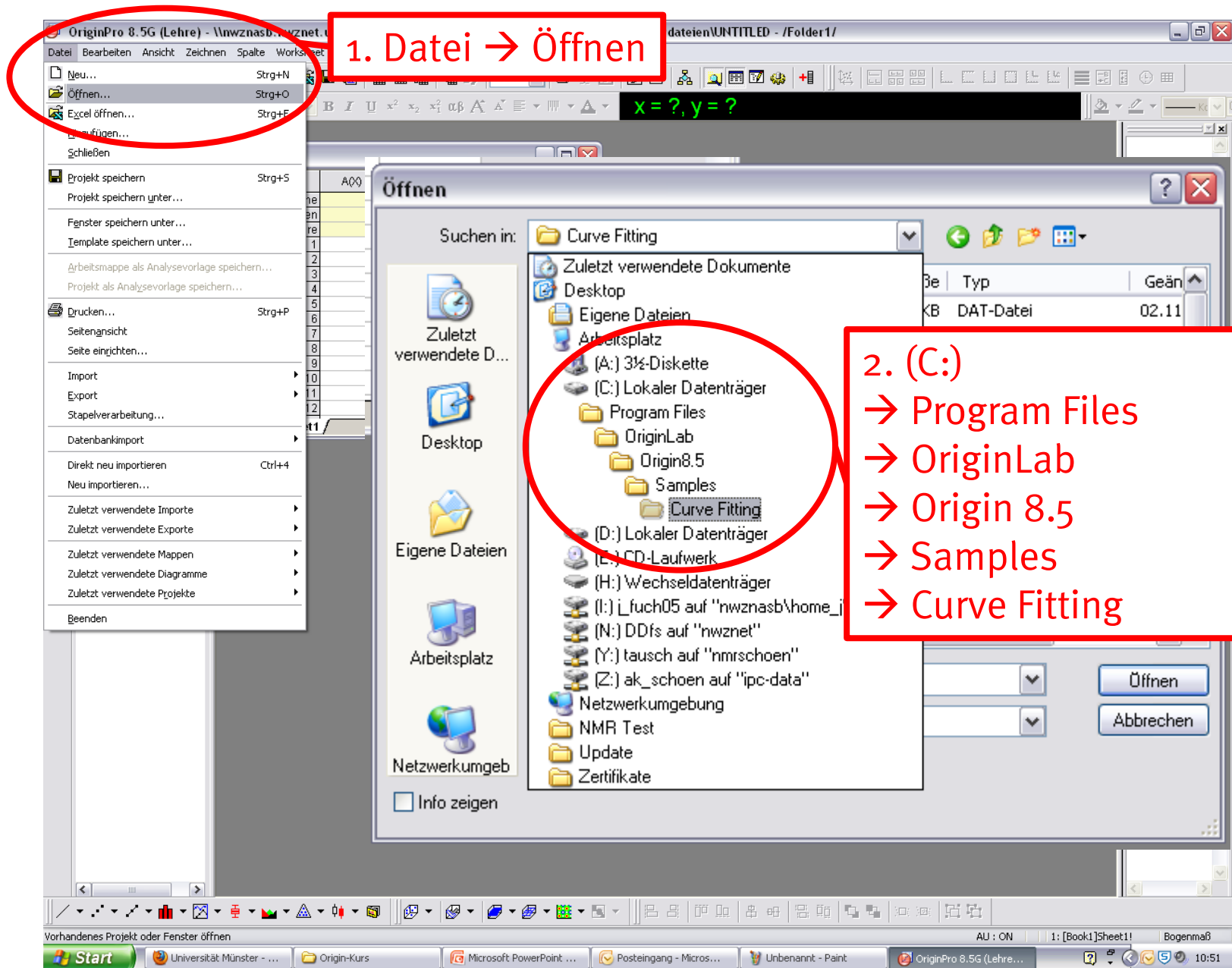
$$G = \{G\}[G]_{SI}$$
$$U = 230 V$$

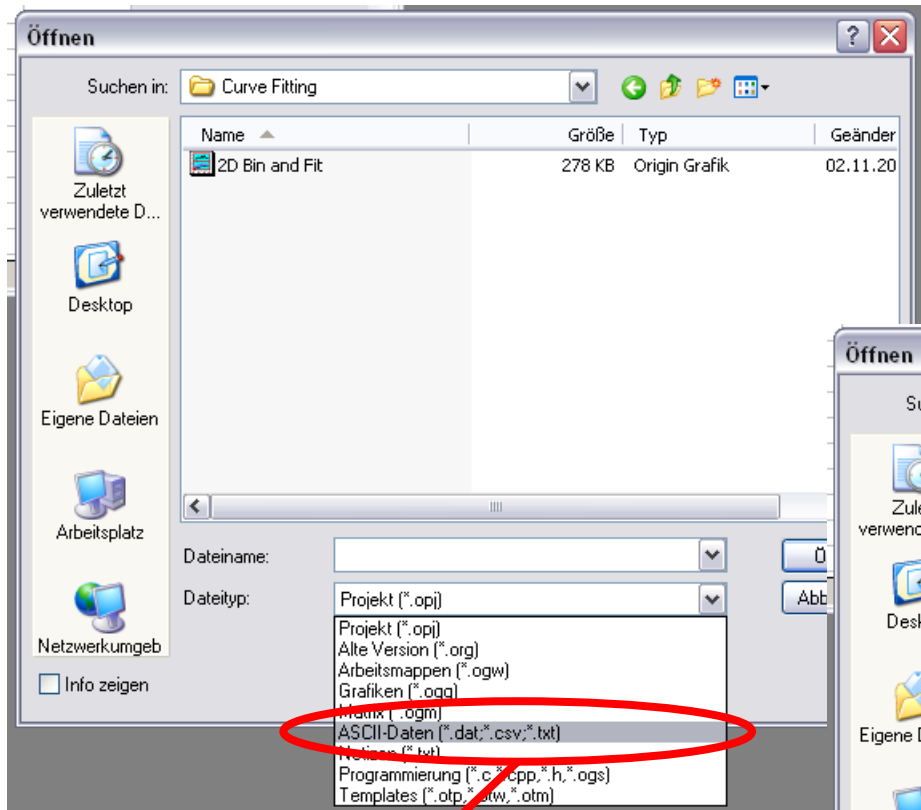
→ [Einheit] → $[[G]]$ → „Einheit von Einheit“ → ?

Richtige Angabe der Einheit in Achsenbeschriftung:

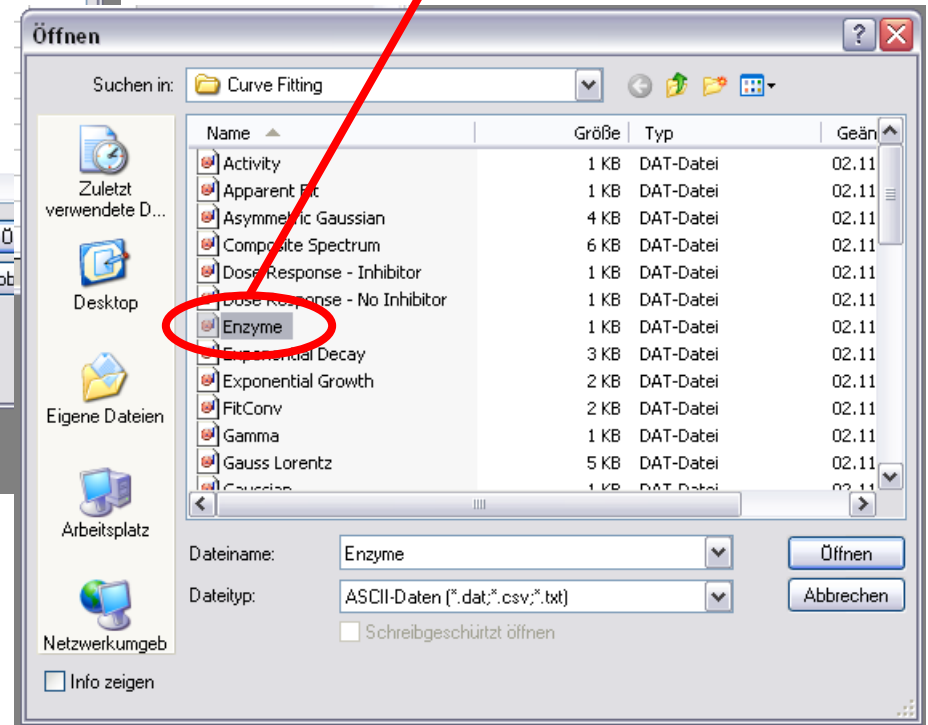
physikalische Größe / Einheit \rightarrow Spannung / V
oder: physikalische Größe in Einheit \rightarrow Spannung in V







1. ASCII-Daten (*.dat, *.csv, *.txt)



2. Enzyme



The screenshot shows the OriginPro 8.5G software interface. A data table is visible with the following content:

Launnam	V	C
Einheiten	μM	$\mu\text{M}/\text{min}$
Kommentare		
1	0.5	580
2	2	1180
3	4	1485
4	6	1630
5	8	1740
6	10	1810
7	12	1860
8	14	1895
9	16	1935
10	18	1940
11	20	1960
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18		
19		
20		
21		
22		
23		
24		
25		
26		
27		
28		
29		
30		
31		
32		
33		
34		
35		
36		
37		

The chart menu is open, showing the following options:

- Punktdiagramm...
- Punktdiagramm mit Ursprung
- Y-Fehlerbalken
- XY-Fehlerbalken
- Vertikale Ankerlinien
- Indizierte Größe
- Farbdiagramm
- Indizierte Farbe und Größe

Three red callout boxes provide instructions:

1. Linksklick in obere, linke Ecke (Cursor verändert sich  \rightarrow )
2. Linksklick auf zweiten Pfeil von links
3. Punktdiagramm

OriginPro 8.5G (Lehre) - \nwznsab.nwznet.uni-muenster.de\home_j\j_fuch05\OriginLab\85\Anwenderdateien\UNTITLED * - /Folder1/ - [Graph1]

1. Doppelklick um Achsentitel zu ändern

$V [\mu\text{M}/\text{min}]$

$\%(?Y,@LL) / \%(?Y,@LU)$

$\%(?X,@LL) / \%(?X,@LU)$

$\%(?X|)$

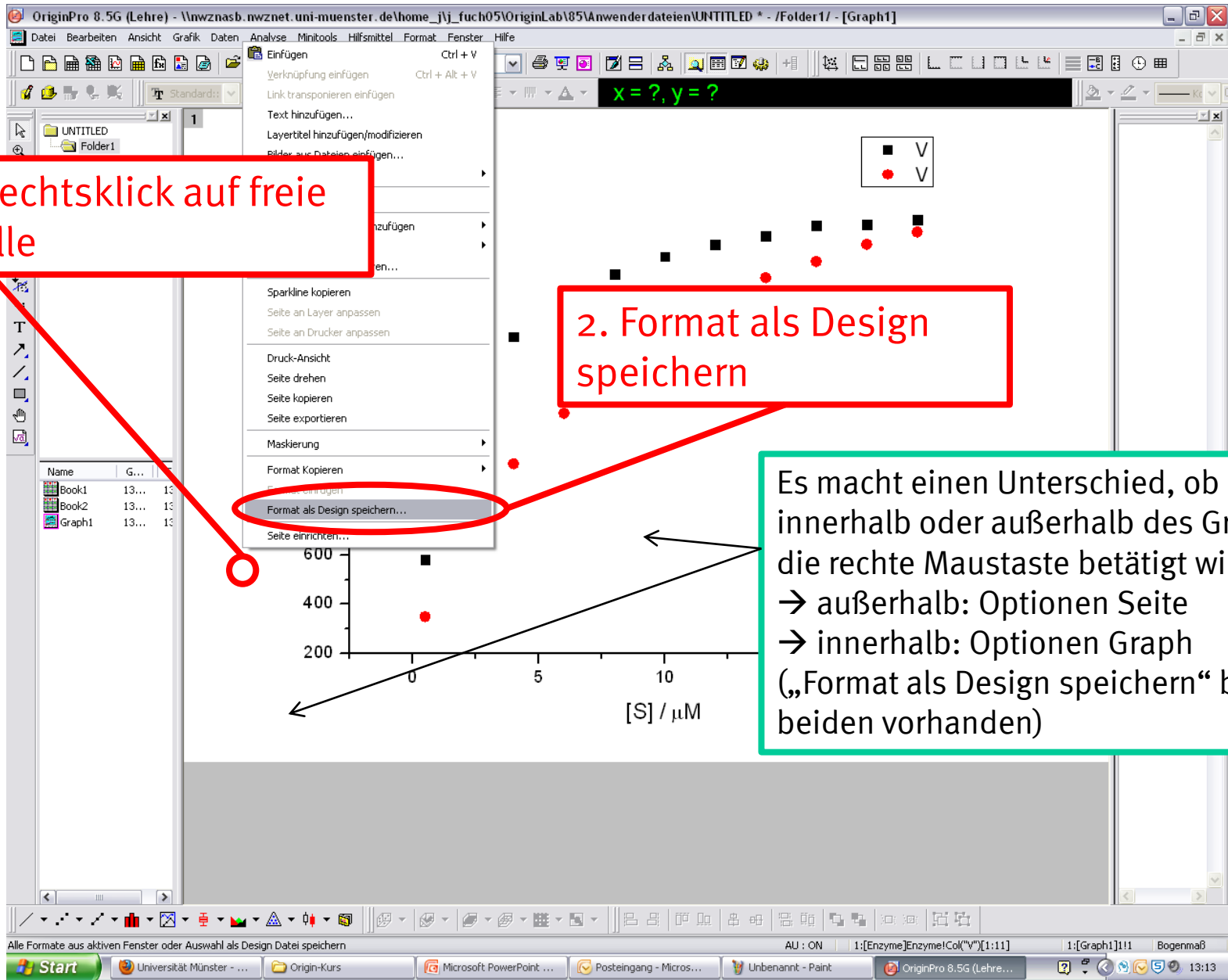
Anschließend nicht Enter drücken, sondern auf freie Stelle klicken.
Achsentitel kann auch beliebig benannt werden.

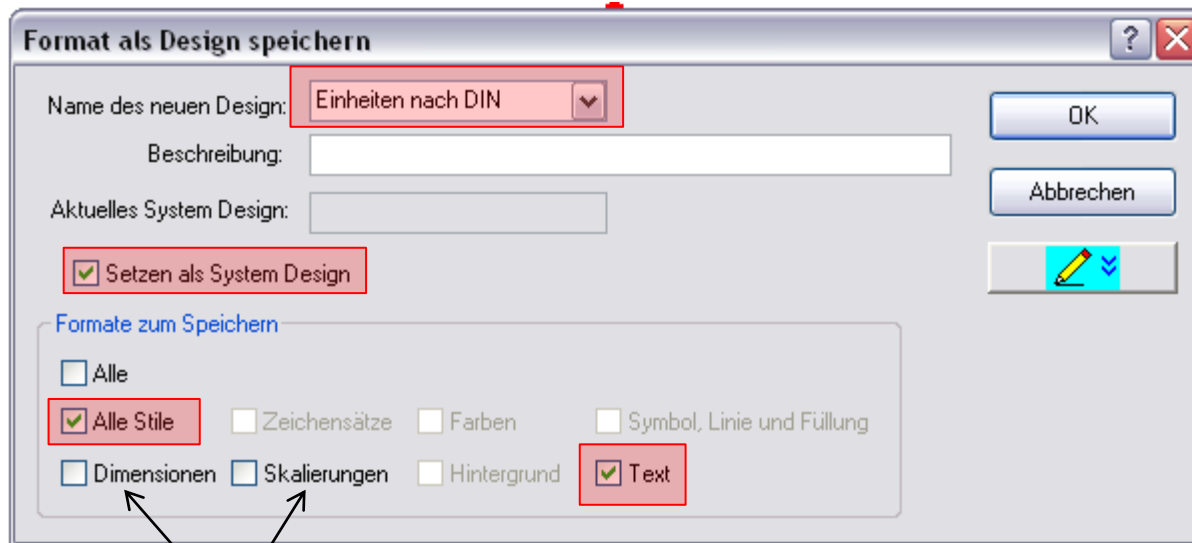
Name	G...	E
Book1	13...	13
Book2	13...	13
Graph1	13...	13

Text: size(actual) = 22(22)

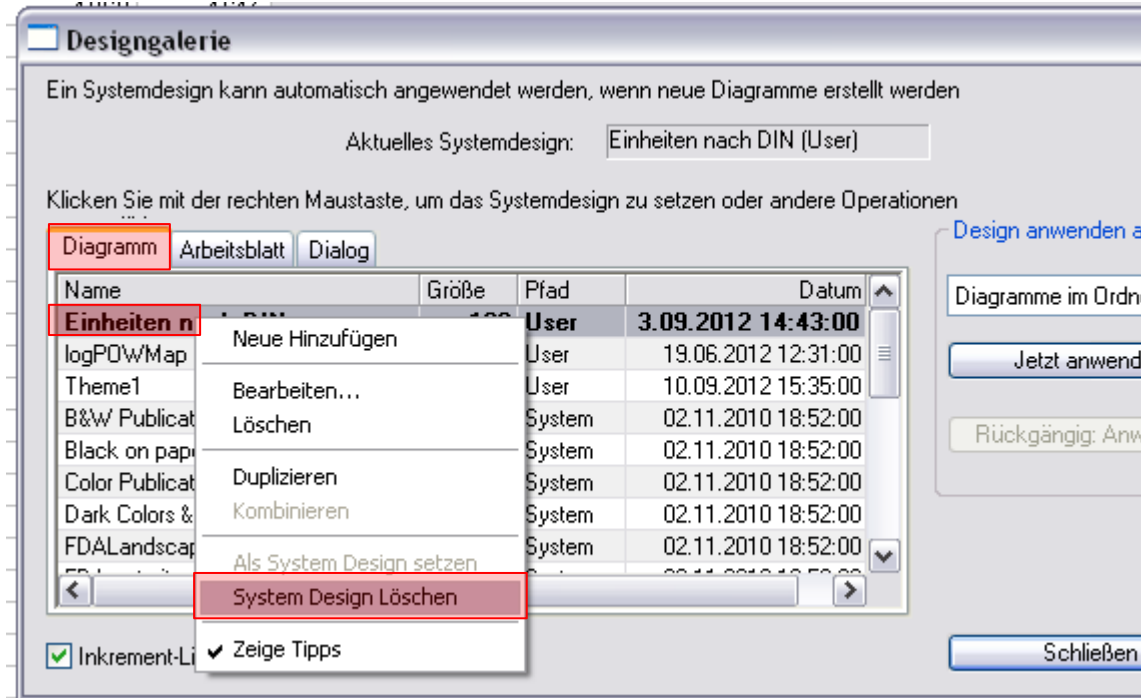
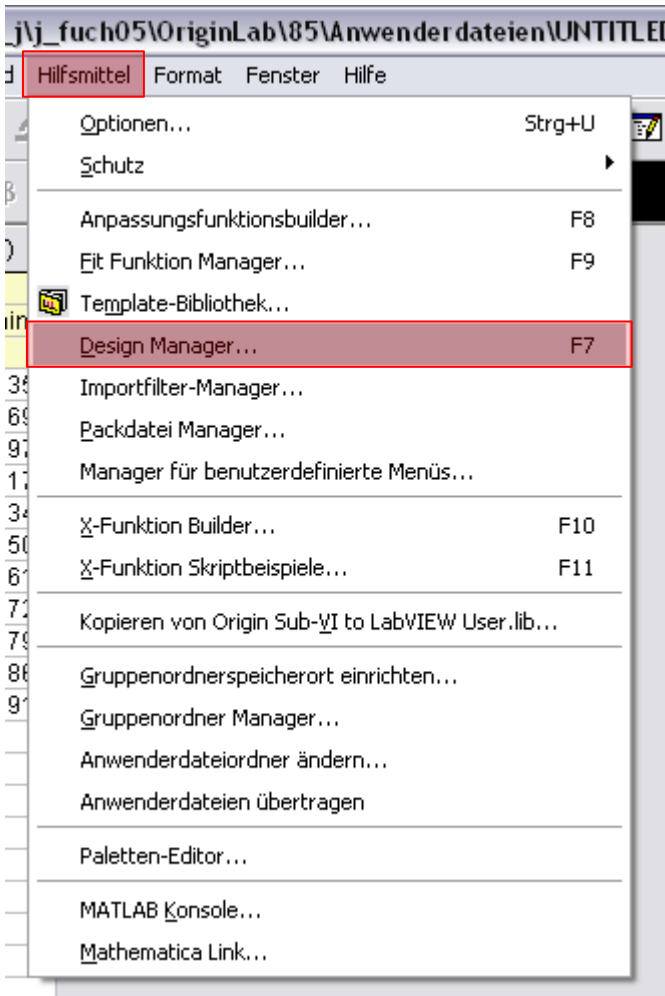
AU : ON | 1:[Enzyme]EnzymelCol("V")[1:11] | 1:[Graph1]111 | Bogenmaß

Start | Universität Münster - ... | Origin-Kurs | Microsoft PowerPoint ... | Posteingang - Micros... | Unbenannt - Paint | OriginPro 8.5G (Lehre... | 12:40





Nicht!



Design kann geändert bzw. auf Standarteinstellungen zurück gesetzt werden unter:

Hilfsmittel → Design Manager → Diagramm → (markiertes Design) rechtecklick → Systemdesign löschen

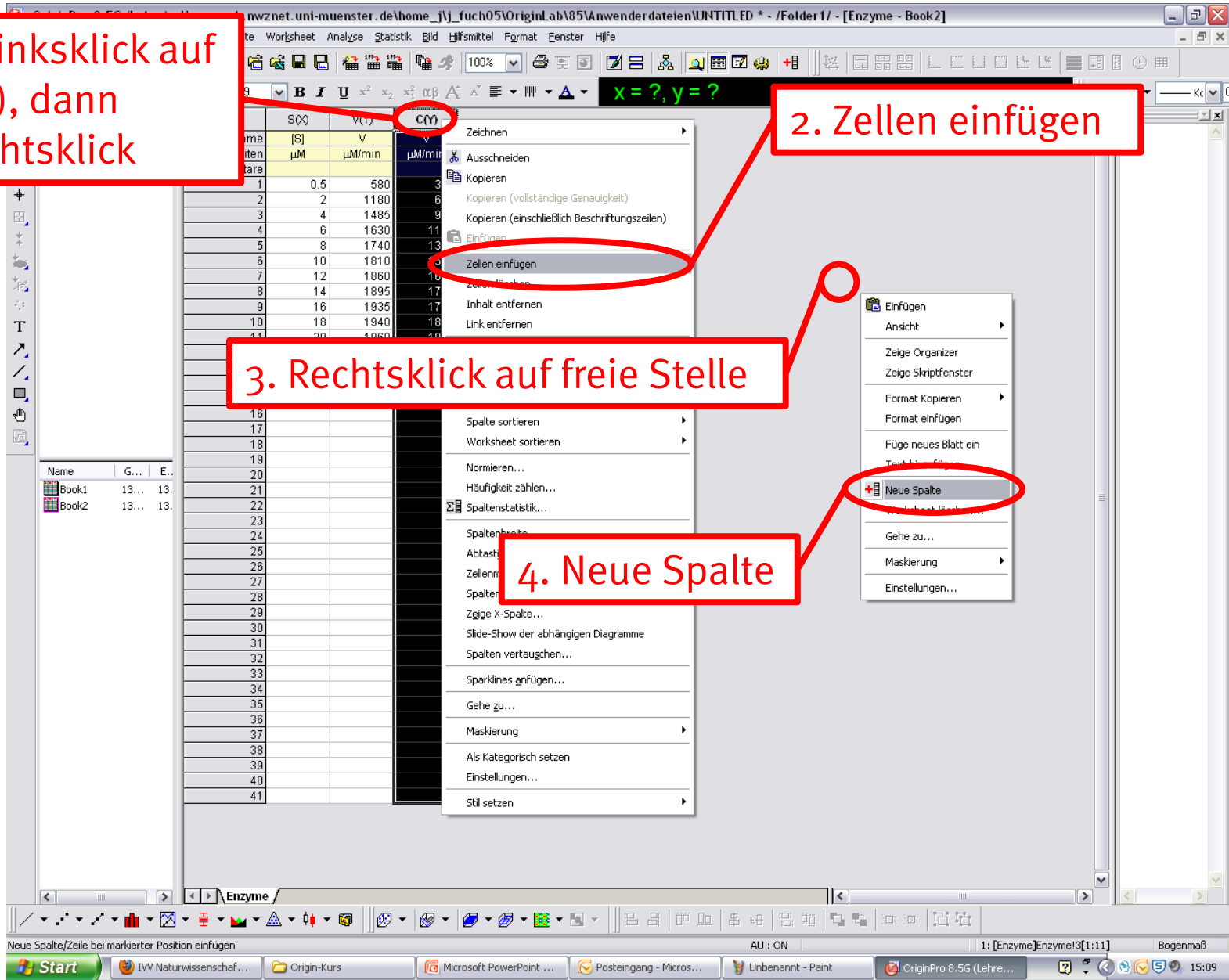
Tabellenkalkulation in Origin

1. Linksklick auf C(Y), dann Rechtsklick

2. Zellen einfügen

3. Rechtsklick auf freie Stelle

4. Neue Spalte



1. Linksklick auf A(Y), dann Rechtsklick

The screenshot shows the Origin software interface. A spreadsheet is open with the following data:

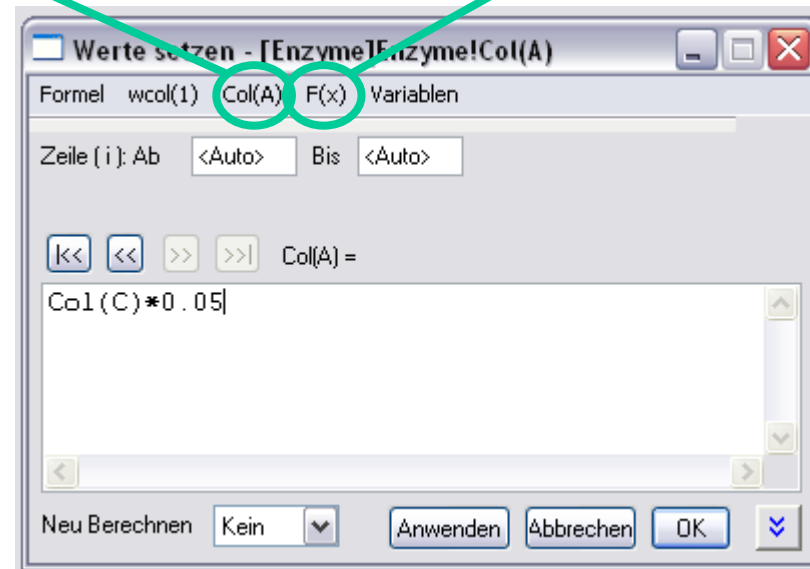
time	S(t)	V(t)	A1(t)	A2(t)
time	μM	$\mu\text{M}/\text{min}$		$\mu\text{M}/\text{min}$
1	0.5	580		350
2	2	1180		690
3	4	1485		970
4	6	1630		1175
5	8	1740		1345
6	10	1810		1500
7	12	1860		1615
8	14	1895		1725
9	16	1935		1790
10	18	1940		1860
11	20	1960		1910

The context menu is open over column A(Y), and the option 'Spaltenwerte errechnen...' is highlighted. A red box points to this option with the text '2. Spaltenwerte errechnen'.

2. Spaltenwerte errechnen

Bezug auf andere Spalten

Funktionsauswahl



1. Linksklick auf A(Y), dann Rechtsklick

	S(Y)	V(Y)	A1(Y)	C(Y)
1	0.5	580	29	350
2	2	1180	59	690
3	4	1485	74.25	970
4	6	1630	81.5	1175
5	8	1740	87	1345
6	10	1810	90.5	1500
7	12	1860	93	1615
8	14	1895	94.75	1705
9	16	1935	96.75	1790
10	18	1940	97	1860
11	20	1950	98	1910

$Col(V) * 0,05$

$Col(C) * 0,05$

2. Setzen als

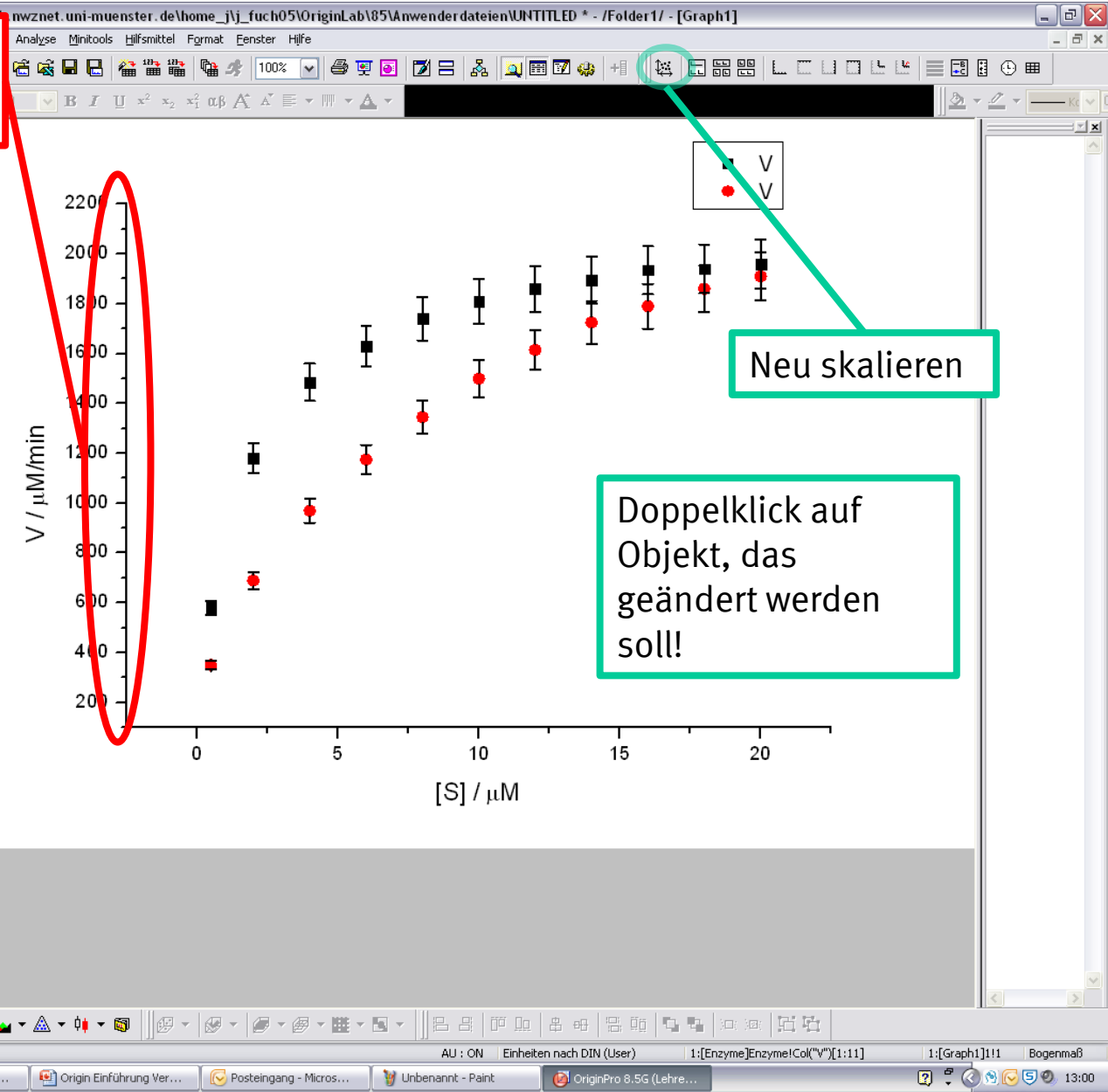
2. y-Fehlerbalken

Auch Col(A1) als y-Fehlerbalken setzen!

5% Fehler hier nur ein Beispiel! Im Praktikum: Fehlerberechnung oder Assistenten fragen

Bearbeitung von Graphen

1. Doppelklick auf y-Achse

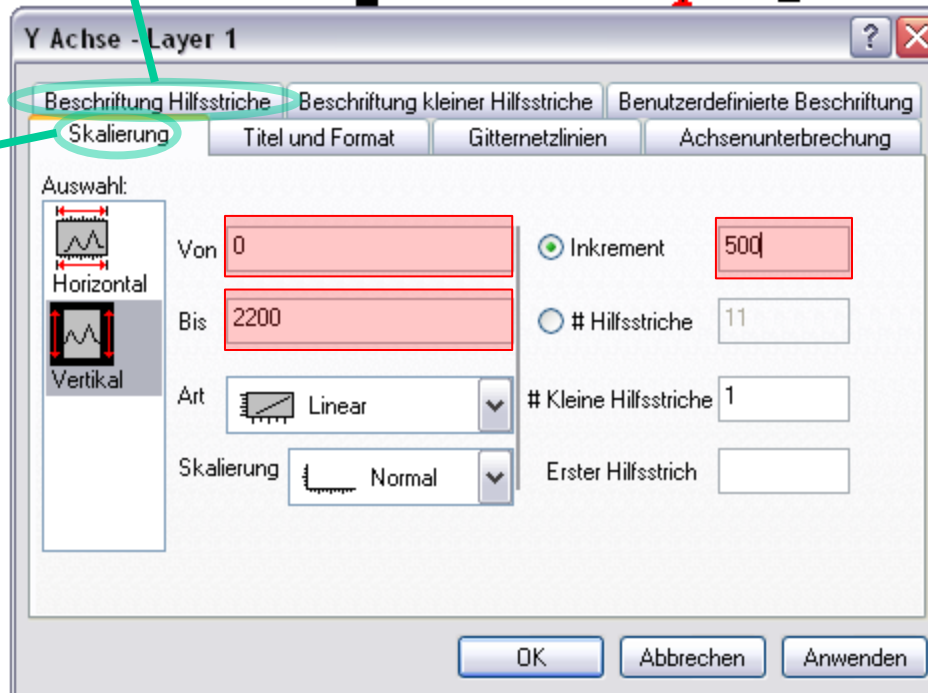


Neu skalieren

Doppelklick auf Objekt, das geändert werden soll!

Bei Doppelklick
auf Beschriftung

Bei
Doppelklick
auf Achse



Bei NMR-Skala: einfach von großer Zahl (Von → 15) zu kleiner Zahl (Bis → -2) eingeben.
Graph wird gespiegelt.

Bei Doppelklick auf Datenpunkte

The screenshot shows a dialog box titled "Details Zeichnung" with a "Datenpunkte" tab selected. On the left, a tree view shows "Graph1" containing "Layer1" with four data points. Each point is a text string with a checkbox. A red oval highlights the first two points, and a red box labeled "Fehlerbalken" points to the first point. A red box labeled "Zum unabhängigen Bearbeiten: Gruppe → Modus: unabhängig" points to the "Gruppe" tab in the configuration panel. The configuration panel has tabs for "Symbole", "Ankerlinien", "Gruppe", "Versatz", and "Beschriftung". The "Gruppe" tab is active, showing a "Vorschau" of a black square, "Größe: 9", "Randbreite" set to "Standard", and a "Symbolfarbe" color picker. There is also a "Transparenz" slider set to 0% and a checkbox for "Überlappende Punkte verschieben". Under "Zeige Details", "Geometrisch" is selected, with options for "Einzelner Buchstabe", "Fortlaufende Buchstaben", "Zeilennummer", and "Benutzerdef. Symbole". The "Form" section shows icons for square, circle, triangle, inverted triangle, diamond, and left-pointing triangle. The "Innen" section shows a "Kompakt" style. At the bottom, there is a "Diagrammtyp" dropdown set to "Punktdiagramm" and buttons for ">>", "Arbeitsmappe", "OK", "Abbrechen", and "Übernehmen".

Details Zeichnung

Datenpunkte

Graph1

Layer1

- [Book2]Enzyme! "[S]"[X], "[V]"[Y] [1*:11*]
- [Book2]Enzyme! "[S]"[X], "[V]"[Y] [1*:11*]
- [Book2]Enzyme! "[S]"[X], "[V]"[Y], A1(yEr) [1*:11*]
- [Book2]Enzyme! "[S]"[X], "[V]"[Y], A(yEr) [1*:11*]

Fehlerbalken

Zum unabhängigen Bearbeiten:
Gruppe → Modus: unabhängig

Symbole Ankerlinien Gruppe Versatz Beschriftung

Vorschau Größe: 9

Randbreite Standard:

Symbolfarbe

Transparenz 0 %

Überlappende Punkte verschieben

Zeige Details

Geometrisch

Einzelner Buchstabe

Fortlaufende Buchstaben

Zeilennummer

Benutzerdef. Symbole

Form

Innen Kompakt

Diagrammtyp Punktdiagramm

>> Arbeitsmappe OK Abbrechen Übernehmen

OriginPro 8.5G (Lehre) - \nwznsab.nwznet.uni-muenster.de\home_j\j_fuch05\OriginLab\85\Anwender.dateien\UNTITLED * - /Folder1/ - [Graph1]

1. Ansicht

2. Zeige

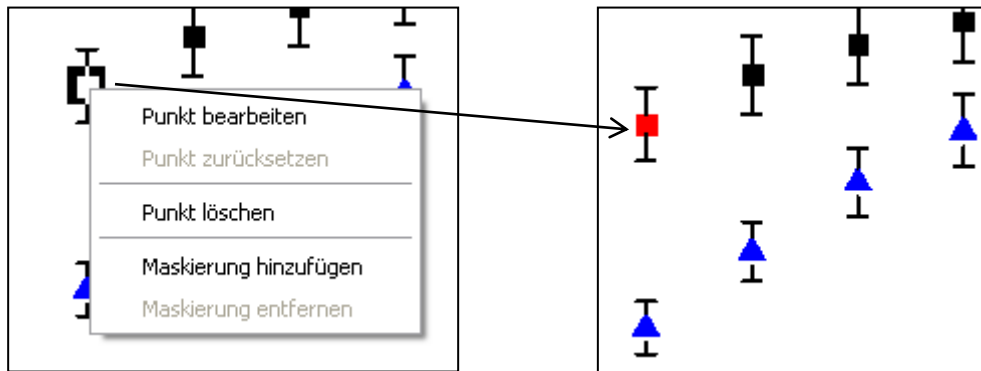
3. Rahmen

■ ohne Inhibitor
▲ mit Inhibitor

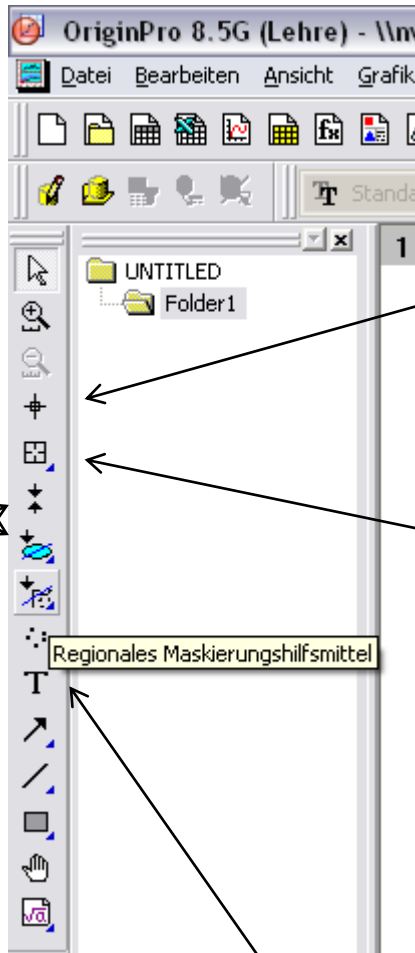
Doppelklick um Schrift zu ändern,
Linksklick zum Verschieben

The screenshot shows the OriginPro 8.5G interface. The 'Ansicht' (View) menu is open, with 'Zeige' (Show) and 'Rahmen' (Frame) highlighted. The graph displays two data series: 'ohne Inhibitor' (black squares) and 'mit Inhibitor' (blue triangles). The x-axis is labeled '[s]' and ranges from 0 to 1. The y-axis ranges from 0 to 1000. A legend in the top right identifies the symbols. A green callout box at the bottom right explains that a double-click on the legend text changes it, and a left-click moves it.

Strg + Linksklick auf einzelnen Datenpunkt,
anschließend **Rechtsklick**



Maskierte Datenpunkte (rot)
werden bei Berechnung einer
Fitkurve nicht berücksichtigt.



Normaler Zeiger

Zoom

Bereich markieren /
auswählen

Maskieren

Zeichnen neuer
Punkte (Enter
zum bestätigen)

$X = 14.7655108; Y = 2147.47191$

Freie Auswahl von
Koordinatenpunkten

[Enzyme]Enzyme!V[9]: $X = 16; Y = 1935$

Auswahl von
Datenpunkten

Data Info

[Enzyme]Enzyme[9]	
Kurzname	Daten (L...
X	16
Y	1935

Fit

1. Analyse

2. Anpassen

3. Nichtlinearer Fit

4. Dialog öffnen

1 <Zuletzt verwendet>
 2 Integrieren: <Standard>...
 3 Nichtlinearer Fit: <Zuletzt verwendet>...
 4 Nichtlinearer Fit: <Standard>...
 5 Differenzieren: <Zuletzt verwendet>...
 6 Basislinie und Peaks: <Standard>...
 7 Impulsanalyse durch Stapelverarbeitung mit Design...

Linearer Fit
 Lineare Anpassung mit X-Eehler...
 Polynomieller Fit
Nichtlinearer Fit
 Nichtlineare Oberflächenapproximation...
 Kurve nachbilden...
 Oberfläche nachbilden...
 Exponentieller Fit...
 Sigmoidaler Fit...
 Datensätze vergleichen...
 Modelle vergleichen...

1 <Zuletzt verwendet>
Dialog öffnen... Ctrl+Y

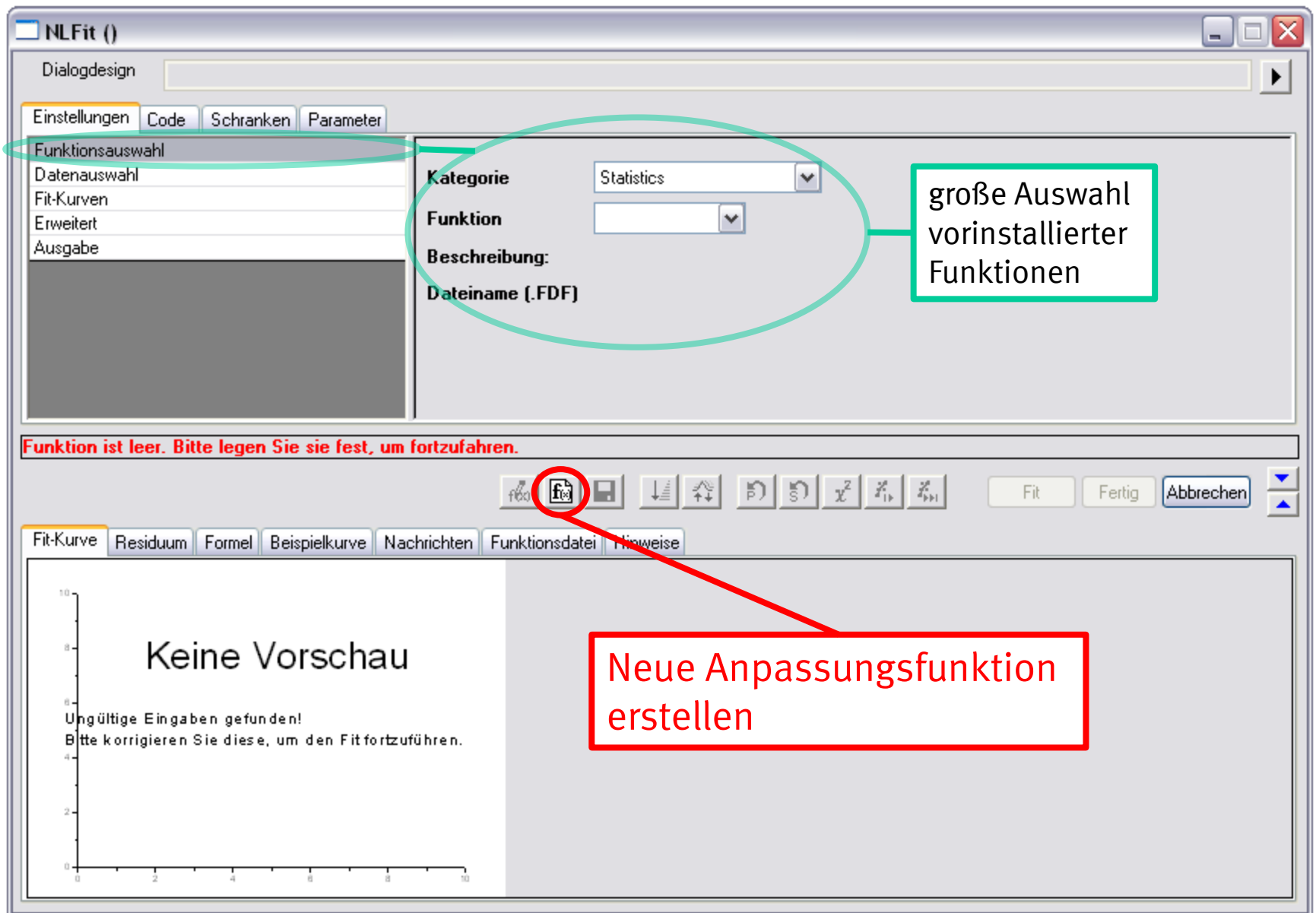
Name G.. E...
 Book1 1... 1...
 Book2 1... 1...
 Graph1 1... 1...

V / $\mu\text{M}/\text{min}$
 1200
 1000
 800
 600
 400
 200
 0

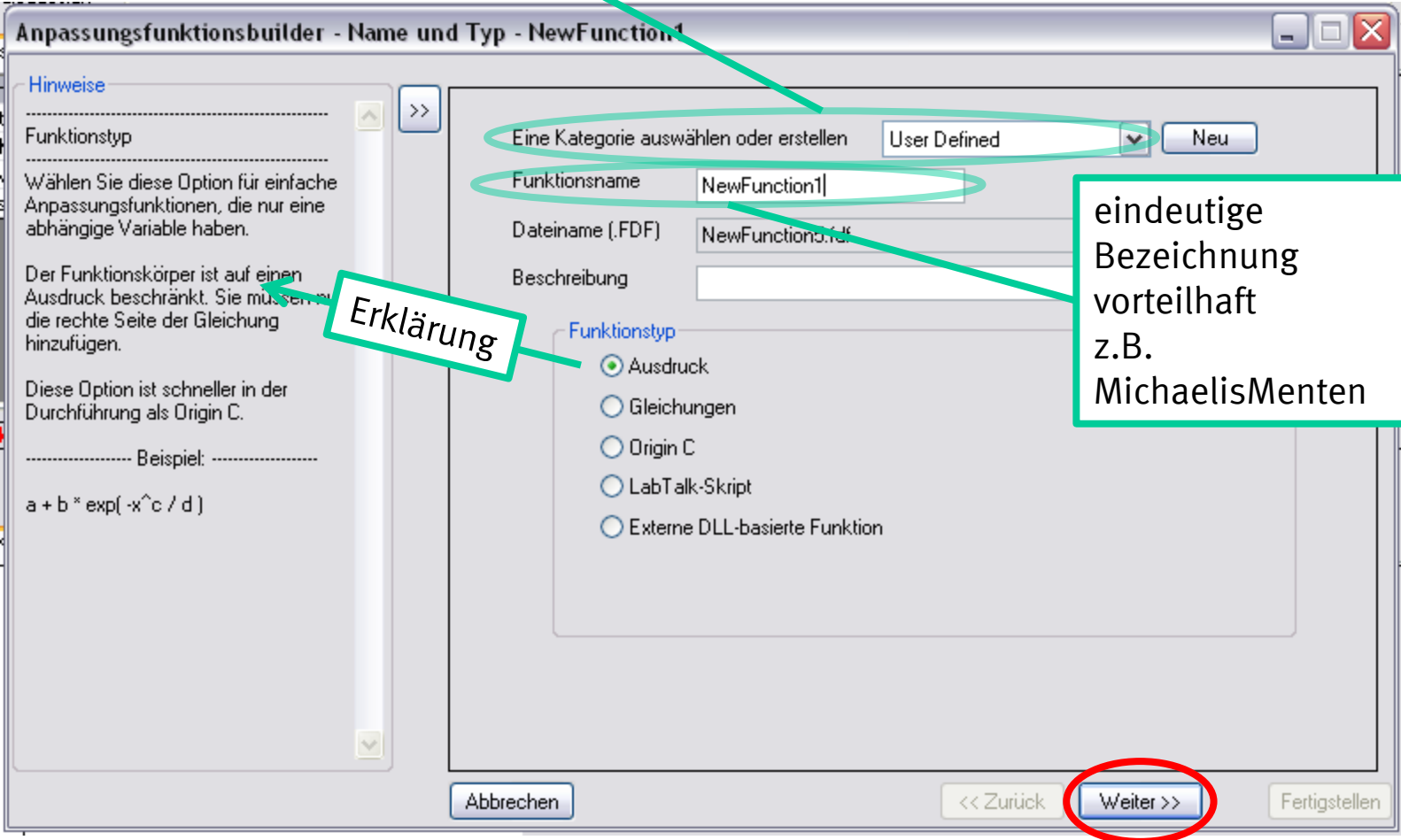
[S] / μM
 0 5 10 15 20

■ ohne Inhibitor
 ▲ mit Inhibitor

FITNL: Nichtlineare Kurvenanpassung durchführen
 AU : ON Einheiten nach DIN (User) 1:[Enzyme]EnzymelCol("V")[1:11] 1:[Graph1]111 Bogenmaß
 Start Universität Münster ... Origin-Kurs Microsoft PowerPoint ... Posteingang - Micros... Unbenannt - Paint OriginPro 8.5G (Lehre... 10:42



Funktion wird einer Kategorie angefügt



Erklärung

eindeutige
Bezeichnung
vorteilhaft
z.B.
MichaelisMenten

$$y = \frac{P_1 x}{P_2 + x}$$

Anpassungsfunktionsbuilder - Variablen und Parameter - NewFunction1

Hinweise
Geben Sie Namen von Variablen, Parametern, abgeleiteten Parametern und Konstanten in die Bearbeitungsfelder ein. Trennen Sie mehrere Namen durch Komma.

----- Beispiel: -----
y1, y2

Abgeleitete Parameter

Abgeleitete Parameter sind zusätzliche Parameter, die aus den Funktionsparameterwerten nach Ende des Anpassungsprozesses berechnet werden.

Konstanten

Konstanten sind festgelegte Werte, die entweder im Funktionsausdruck oder im Parameterinitialisierungscode verwendet werden.

>>

Unabhängige Variablen: x

Abhängige Variablen: y

Parameter: A

Abgeleitete Parameter:

Konstanten:

Impulsfunktion

Abbrechen << Zurück Weiter >> Fertigstellen

Parameter angeben: vmax, KM

Anpassungsfunktionsbuilder - Ausdrucksfunktion - MichaelisMenten

Hinweise

Registerkarte Parameter

In der Spalte "Anfangswerte" eingebene Werte werden beim Anpassen als Startparameterwerte verwendet.

Aktivieren Sie das Kontrollkästchen "Fest", wenn ein bestimmter Parameter während des Anpassens nicht variiert werden sollte. Sie können das auch später im Dialogfeld der nichtlinearen Anpassung festlegen.

Alternativ geben Sie die "Einheit" für den Parameter ein.

Registerkarte Konstanten

Konstanten sind feste Werte, die entweder im Funktionsausdruck verwendet werden können oder im Parameterinitialisierungscode. Die Spalte "Wert" sollte nicht leer sein, wenn Sie eine Konstante definiert haben.

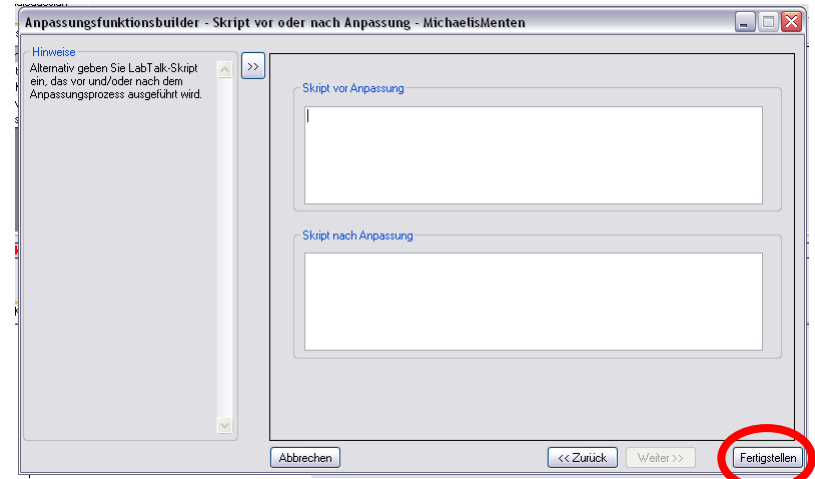
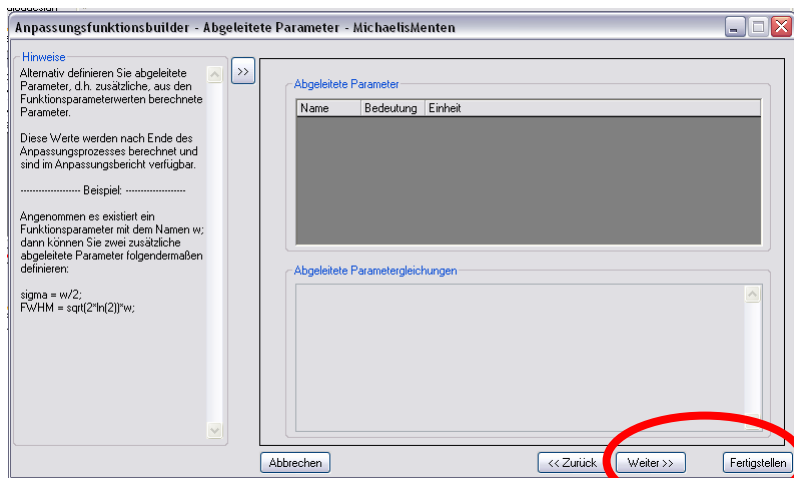
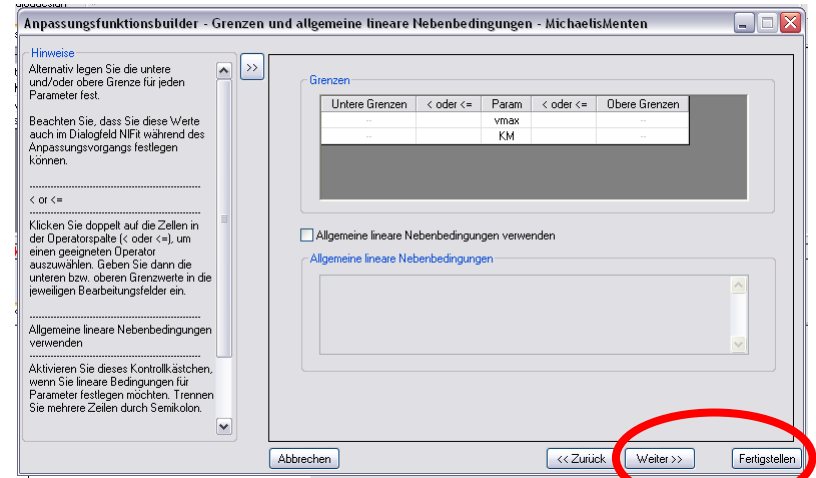
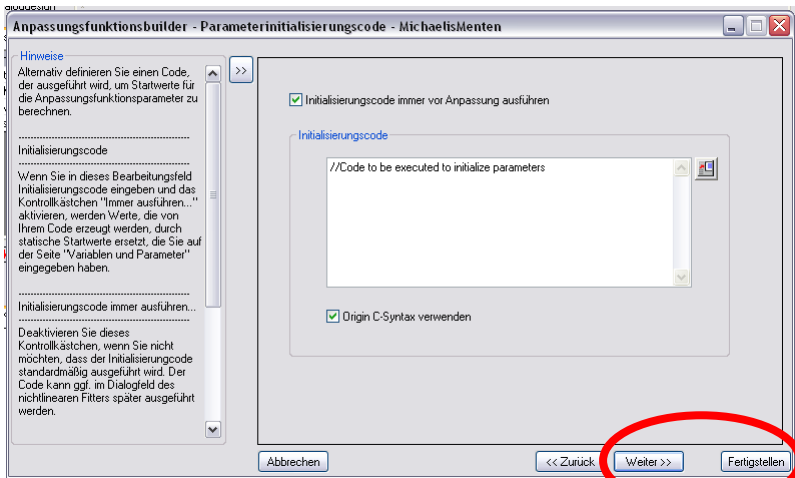
Param	Einheit	Bedeutung	Fest	Anfangswerte	Signifikante Stellen
vmax		?	<input type="checkbox"/>	1	System
KM		?	<input type="checkbox"/>	1	System

Funktionskörper

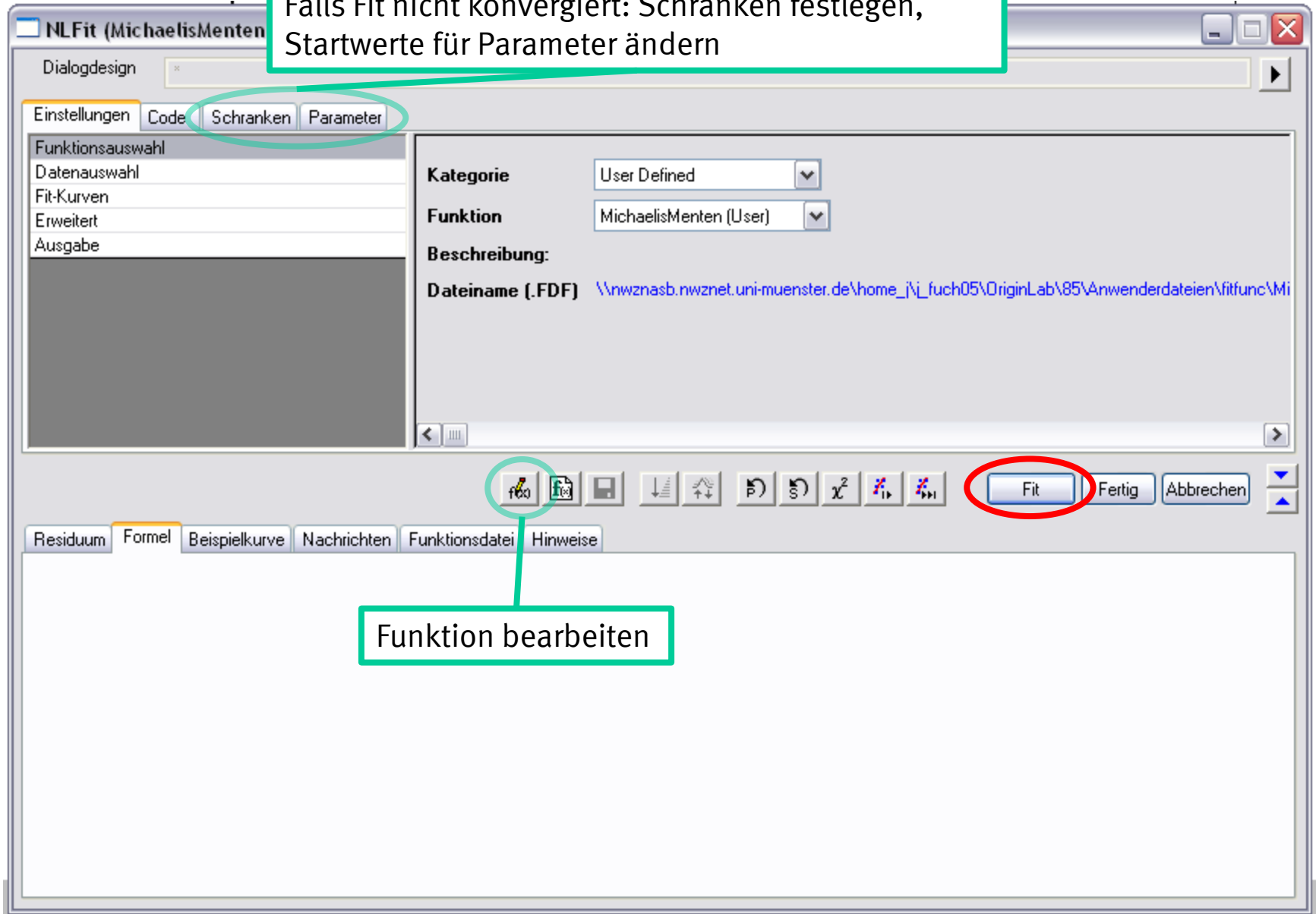
$y = \text{vmax} * x / (\text{KM} + x)$

Schnellprüfung

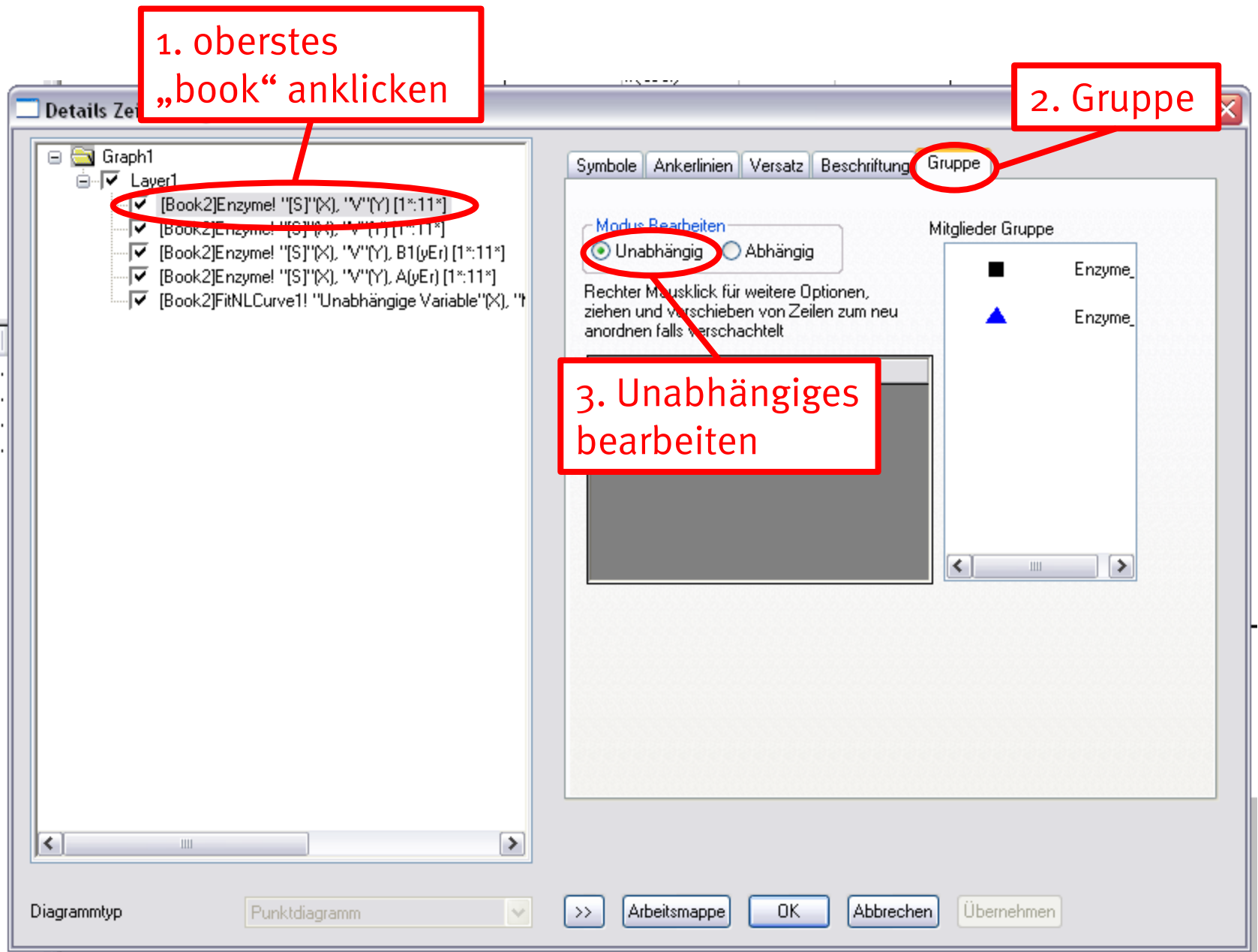
x =



Falls Fit nicht konvergiert: Schranken festlegen,
Startwerte für Parameter ändern



Funktion bearbeiten



OriginPro 8.5G (Lehre) - Z:\j_fuch05\Origin-Kurs\UNTITLED - /Folder1/ - [Graph1]

Standard: 0 B I U x² x₂ x₂ αβ A' A' x y z

$x = ?, y = ?$

Parameter ändern ...

- Parameter ändern...
- Entfernen
- Gehe zu Quelle
- Gehe zu Ergebnissen
- Eingabedaten mit Datenmarkern zeichnen
- Neu Berechnen Modus: Manuell
- Neu Berechnen Modus: Automatisch
- Neu Berechnen Modus: Kein
- Information anzeigen (FitNL)

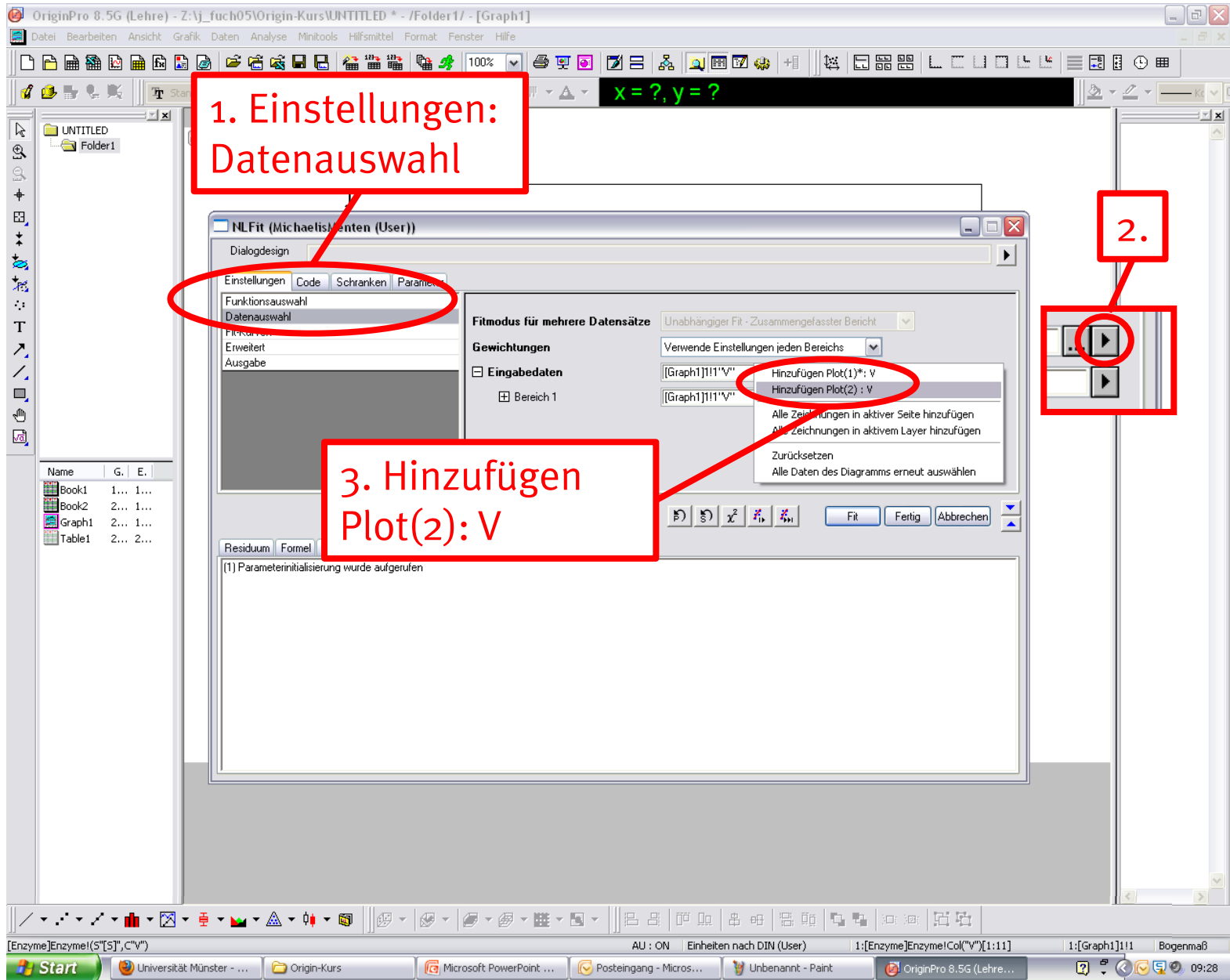
Modell	Michaelis-Menten (User)		
Gleichung	$v_{max} \cdot x / (K_M + x)$		
Chi-Quadrat Reduziert	0.29412		
Kor. R-Quadrat	0.99668		
	Wert	Standardfehler	
v	v_{max}	2049.38072	24.64491
K	K_M	1.33643	0.05857

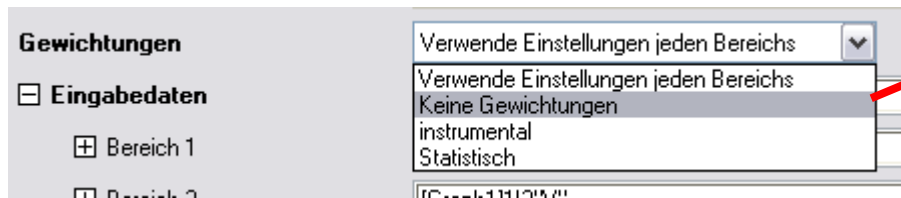
Name | G. | E.

Book1	1...	1...
Book2	2...	1...
Graph1	2...	1...
Table1	2...	2...

[Enzyme]Enzyme!(S"[S]",C"V") AU : ON Einheiten nach DIN (User) 1:[Enzyme]Enzyme!Col("V")[1:11] 1:[Graph1]111 Bogenmaß

Start | Universität Münster - ... | Origin-Kurs | Microsoft PowerPoint ... | Posteingang - Micros... | Unbenannt - Paint | OriginPro 8.5G (Lehre... | 09:25





1. Keine
Gewichtung

2. Fit

Verwende Einstellungen jeden Bereichs:

→ manuelle, unterschiedliche Einstellungen abhängig vom Bereich

Keine Gewichtung:

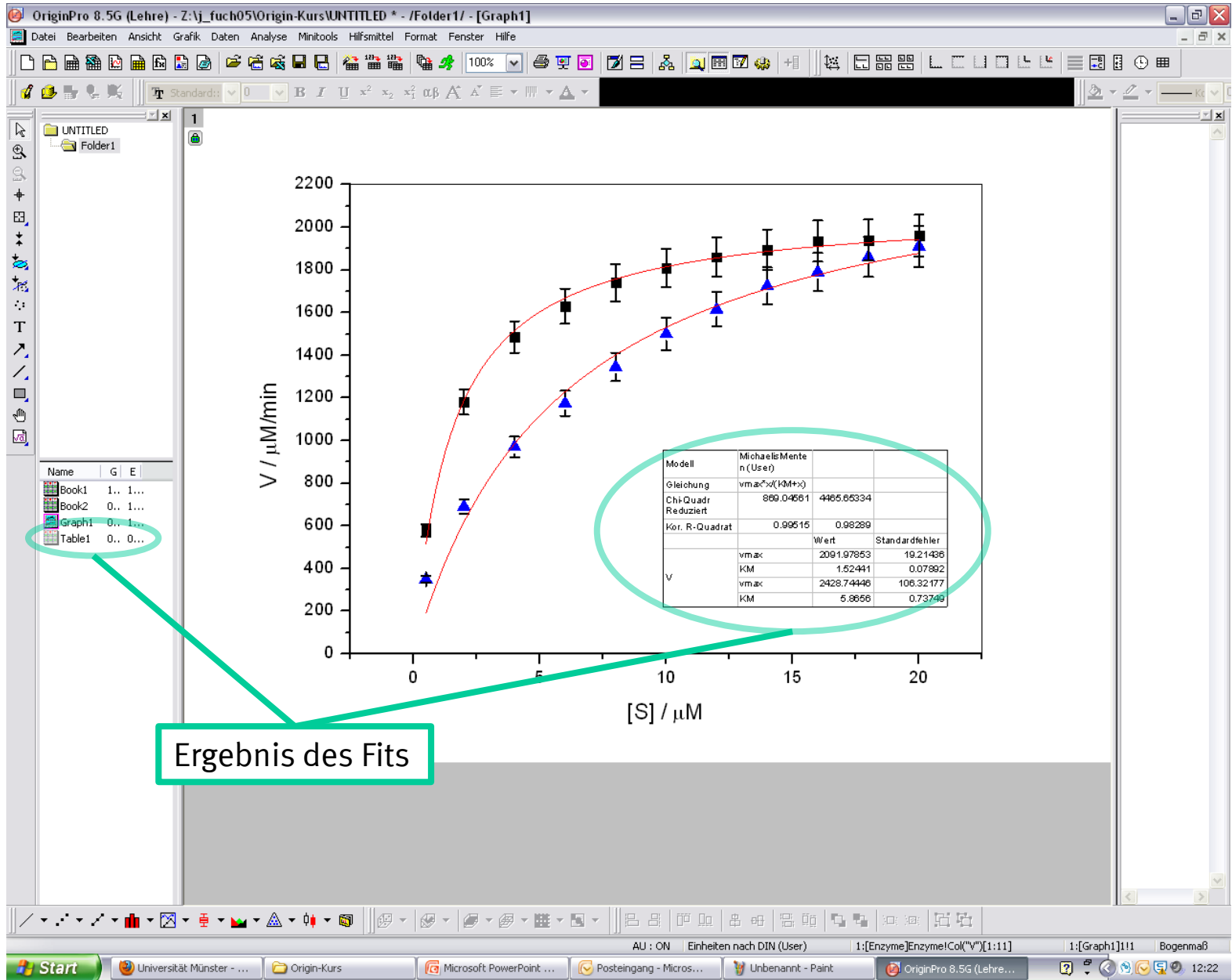
→ Alle Datenpunkte werden bei der Berechnung der Fitkurve gleich gewichtet.

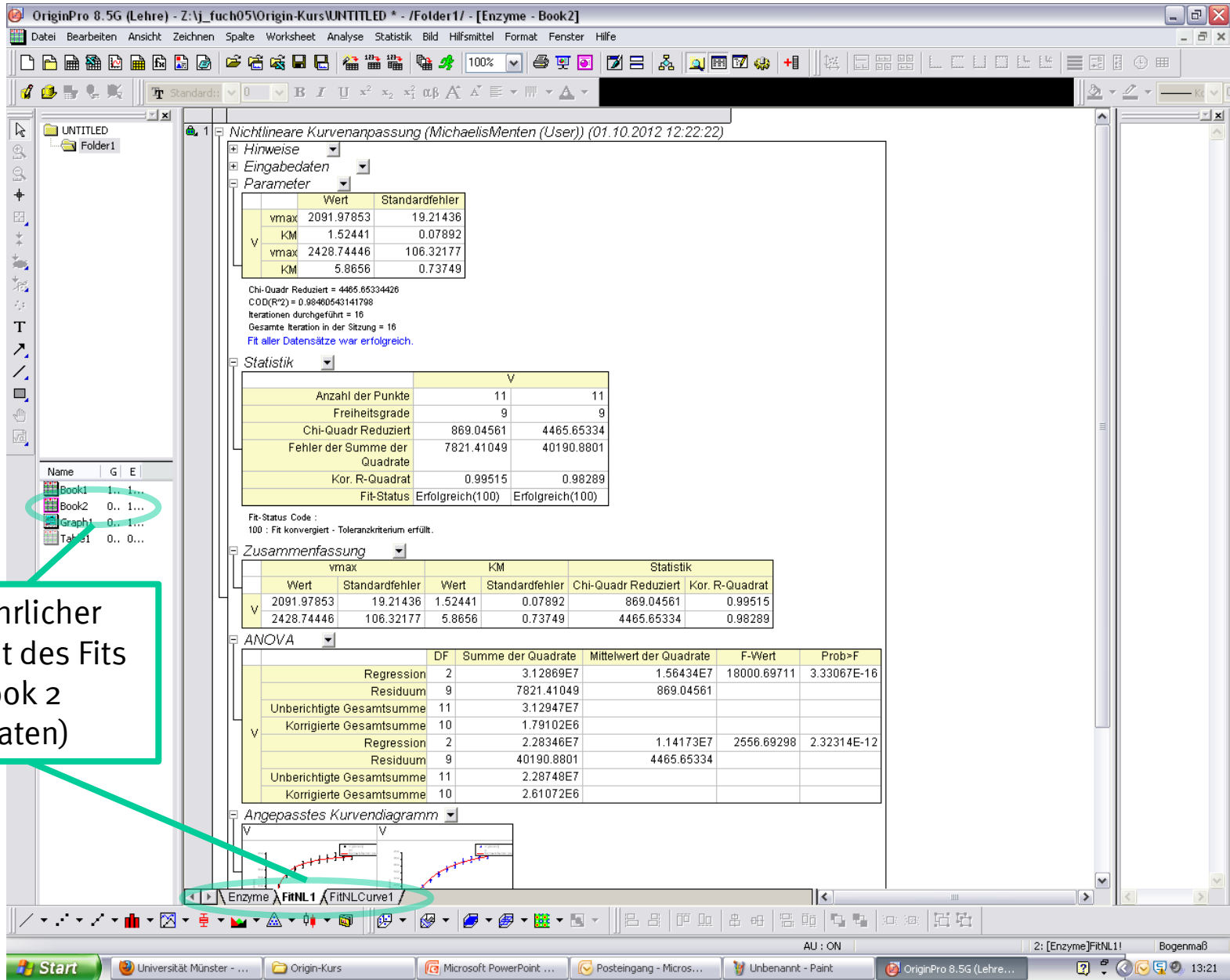
Instrumental:

→ Fehlerbalken werden bei der Berechnung der Fitkurve berücksichtigt.

Statistisch:

→ Datenpunkte mit kleinen y-Werten sind ungenauere Messergebnisse.
Je kleiner, desto weniger Gewicht haben sie in die Berechnung der Fitkurve.





Ausführlicher Bericht des Fits bei Book 2 (Rohdaten)

Reduziertes Chi²: „Obwohl dieser Wert im Anpassungsprozess minimiert wird, ist er zur Beurteilung der Qualität des Fits jedoch nicht wirklich geeignet“

Besser: korrigiertes R² → 1



Woher weiß ich, ob mein Anpassungsergebnis gut ist?

Wenn Sie einen nichtlinearen Kurvenfit durchführen, wird eine iterative Methode benutzt, die den **reduzierten Chi²-Wert** minimiert und damit bestmögliche Parameterwerte liefert. Der **reduzierten Chi²** wird berechnet durch Division der **Restsumme der Quadrate (RSS)** durch die **Freiheitsgrade (DOF)**. Obwohl dieser Wert im Anpassungsprozess minimiert wird, ist er zur Beurteilung der Qualität des Fits jedoch nicht wirklich geeignet. Wenn die Y-Daten beispielsweise mit einem Skalenfaktor multipliziert wurden, wird das reduzierten Chi² auch skaliert.

Ein besserer Wert kann der **R-Quadrat**-Wert sein, der auch als **Determinationskoeffizient** bekannt ist. Je näher die Anpassung an den Datenpunkten liegt, desto näher kommt **R-Quadrat** an den Wert 1. Ein größerer Wert von **R-Quadrat** bedeutet nicht notwendigerweise eine bessere Anpassung, da die Freiheitsgrade den Wert ebenfalls beeinflussen können. Werden also zusätzliche Parameter eingeführt, steigt der **R-Quadrat** Wert an, jedoch bedeutet dies nicht eine bessere Anpassung. Der **korrigierte R-Quadrat** Wert richtet sich nach den Freiheitsgraden und ist somit ein besseres Maß für die Güte des Fits.

Origin gibt R-Quadrat- und korrigierte R-Quadrat-Werte sowohl für lineare und polynomielle Fits als auch nichtlineare Fits sowie den reduzierten Chi²-Wert für nichtlineare Fits. Das Ausgabeberichtsblatt kann so angepasst werden, dass es diese Werte enthält oder nicht.

Statistisch gesprochen ist es besser, zwei Anpassungsergebnisse zu vergleichen als zu fragen, ob ein Fit gut ist. OriginPro bietet statistische Testverfahren, um Anpassungsergebnisse zu vergleichen, die durch Anwenden zwei verschiedener Modelle auf einen Datensatz entstehen. So kann man beispielsweise die Anpassungsergebnisse für Zerfallsdaten von Exponentialanpassungsfunktionen mit ein oder zwei Termen vergleichen und feststellen, ob die Anwendung des Modells mit den zwei Termen angemessen ist. Auch kann man zwei Datensätze mit einem Modell anpassen und die Ergebnisse vergleichen, um festzustellen, ob beide Datensätze derselben Population angehören.

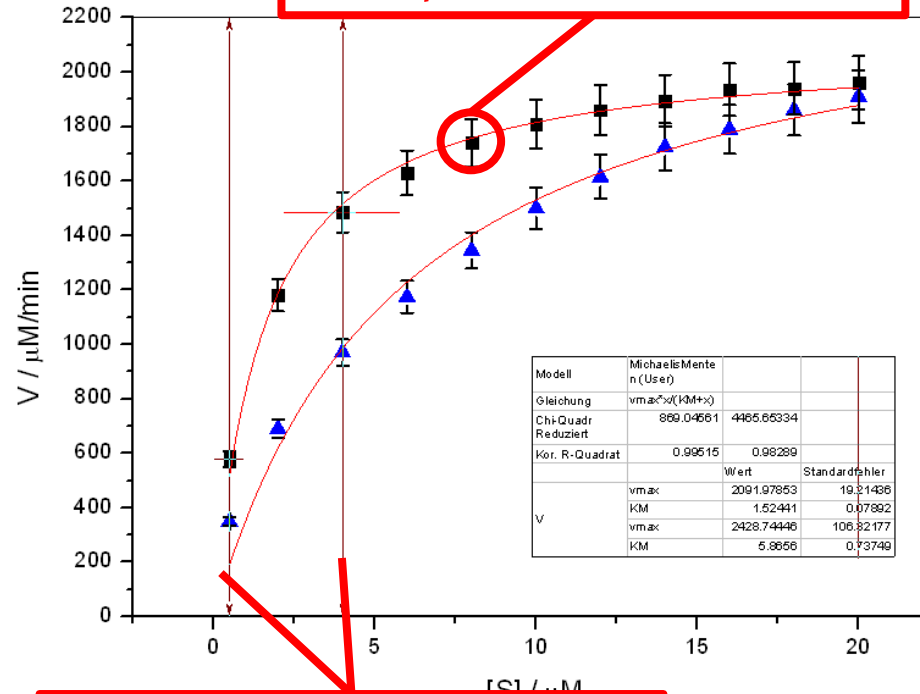
Schlüsselwörter: Qualität, Güte, Chi-Quadrat, R-Quadrat, Chi², R², schlecht, gering

http://www.originlab.de/www/helponline/Origin/de/mergedProjects/QuickHelp/QuickHelp/How_do_I_know_if_my_fit_result_is_good.html

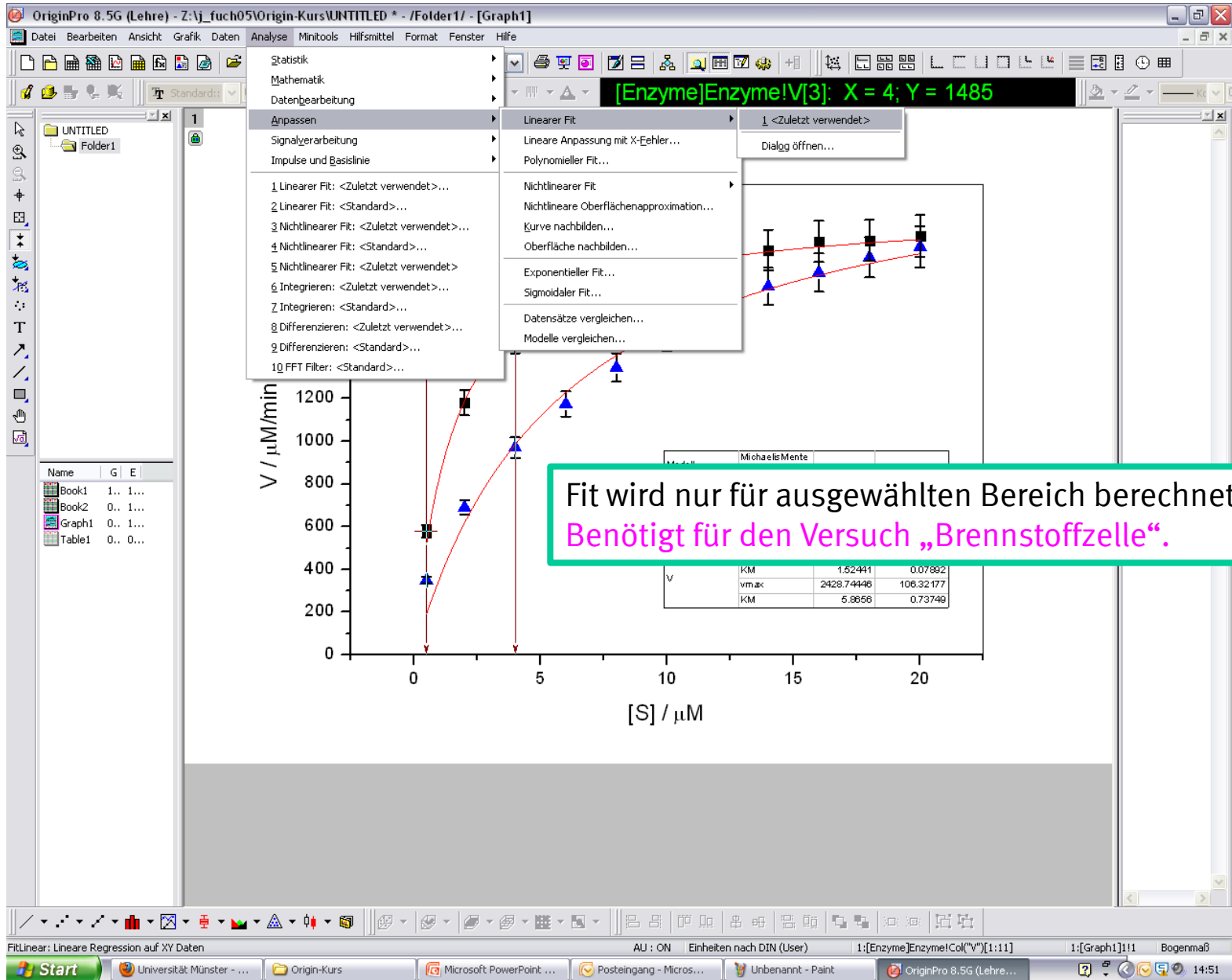
Zusätzliche Tipps

1. Werkzeug:
Datenbereich
setzen

2. Datensatz auswählen
→ Linksklick auf
Messpunkt



3. Bereich festlegen durch
Verschieben der Marker
(linke Maustaste gedrückt
halten)



05\Origin-Kurs\UNTITLED * - /Folder1/ - [Graph1]

Analyse Minitools Hilfsmittel Format Fenster Hilfe

Statistik

Mathematik

Datenbearbeitung

Anpassen

Signalverarbeitung

Impulse und Basislinie

1 Linearer Fit: <Zuletzt verwendet>

2 Linearer Fit: <Zuletzt verwendet>...

3 Linearer Fit: <Standard>...

4 Nichtlinearer Fit: <Zuletzt verwendet>...

5 Nichtlinearer Fit: <Standard>...

6 Nichtlinearer Fit: <Zuletzt verwendet>...

7 Integrieren: <Zuletzt verwendet>...

8 Integrieren: <Standard>...

9 Differenzieren: <Zuletzt verwendet>...

10 Differenzieren: <Standard>...

Spuren interpolieren...

Interpolieren/Extrapolieren...

XYZ-Spuren interpolieren...

2D Interpolation/Extrapolation...

XYZ-Oberflächenbereich...

Kurven normieren...

Einfache Kurvenmathematik...

Differenzieren

Integrieren

2D-Volumen integrieren...

Bereich der Matrixoberfläche...

Polygonfläche...

Mehrere Kurven mitteln...

Benutzerdefinierter Filter...

Median-Filter...

Spezieller Filter...

1 <Zuletzt verwendet>

Dialogg öffnen...

Gleichung	$y = a +$
Gewichtung	instrum
Fehler der Summe der Quadrate	
Pearson R	
Kor. R-Quadrat	
	Schnitt der Y.
	Steigung

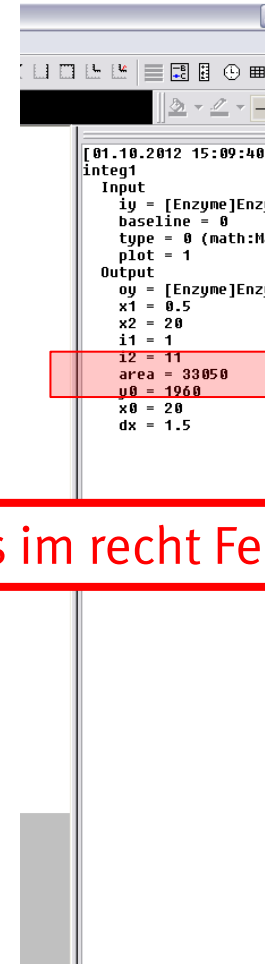
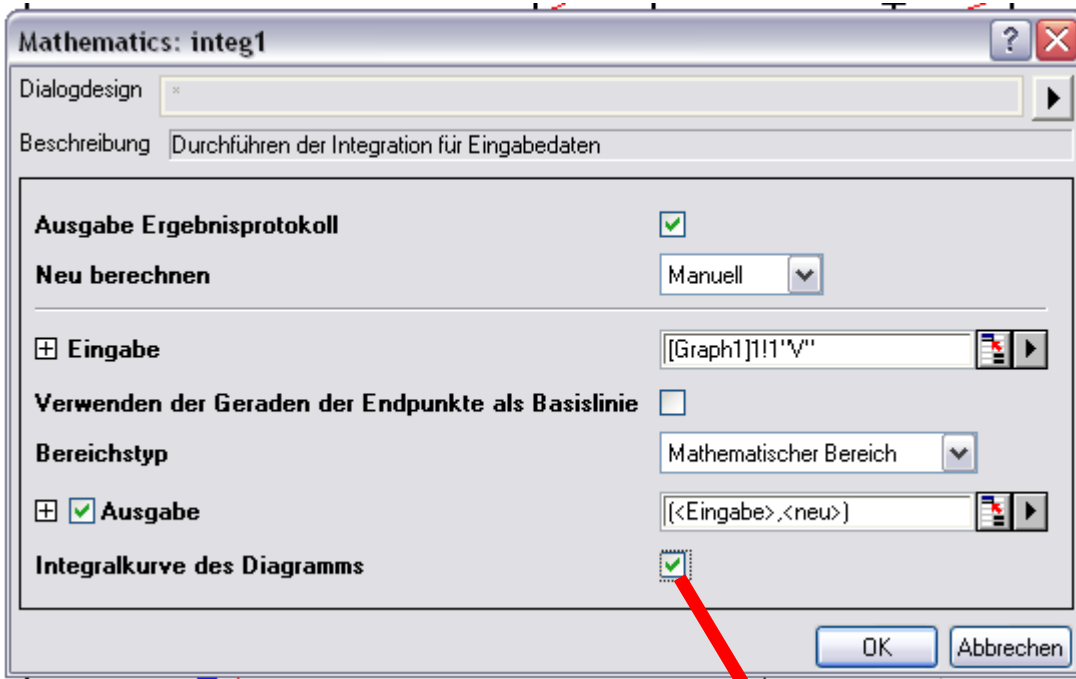
µM/min

1200

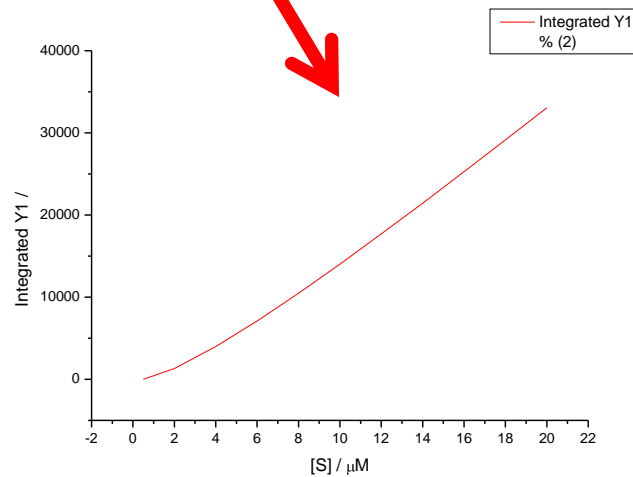
1000

Michaelis-Mente

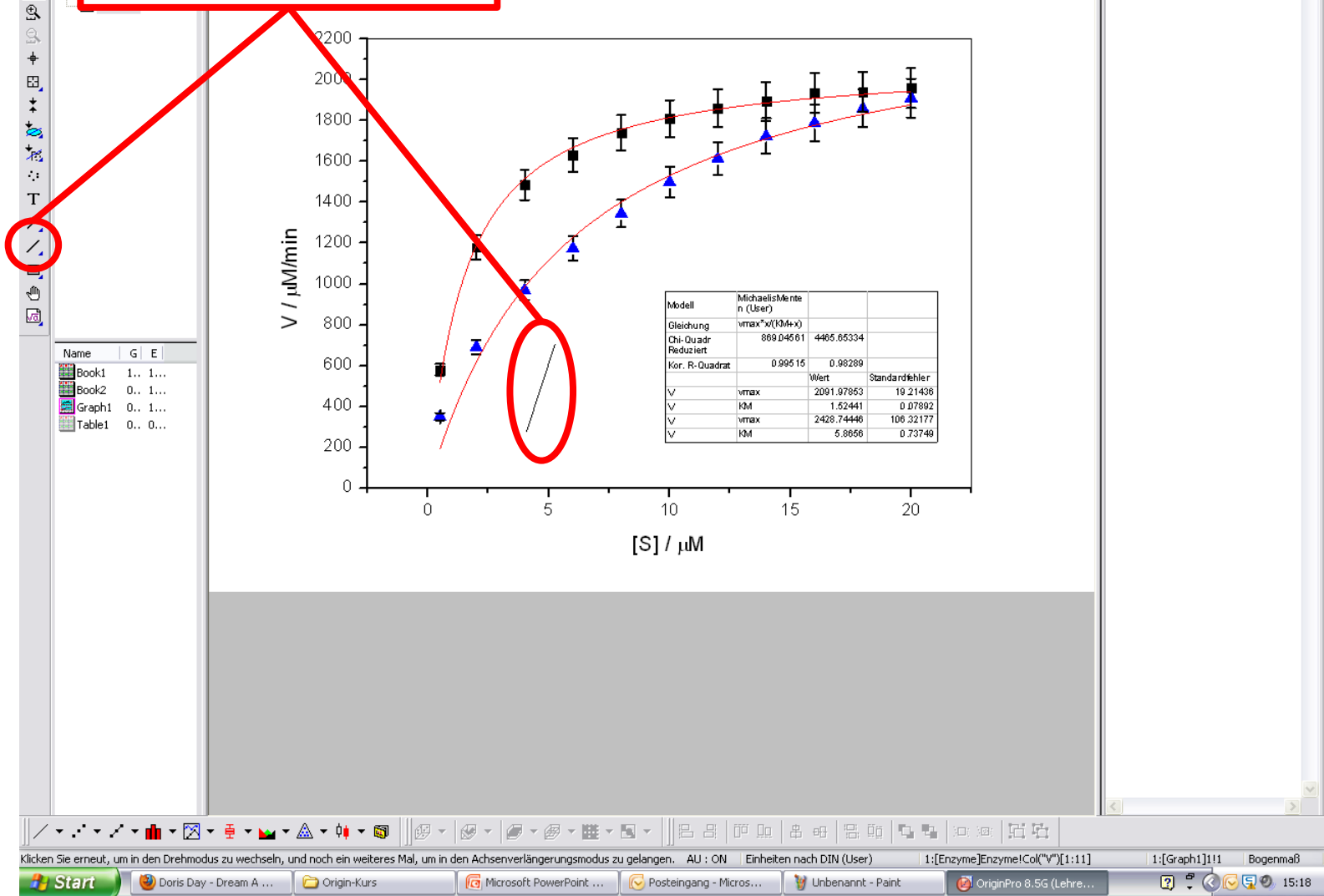
Integration: Benötigt für den Versuch „Enzymkinetik“.



Ergebnis im recht Fenster

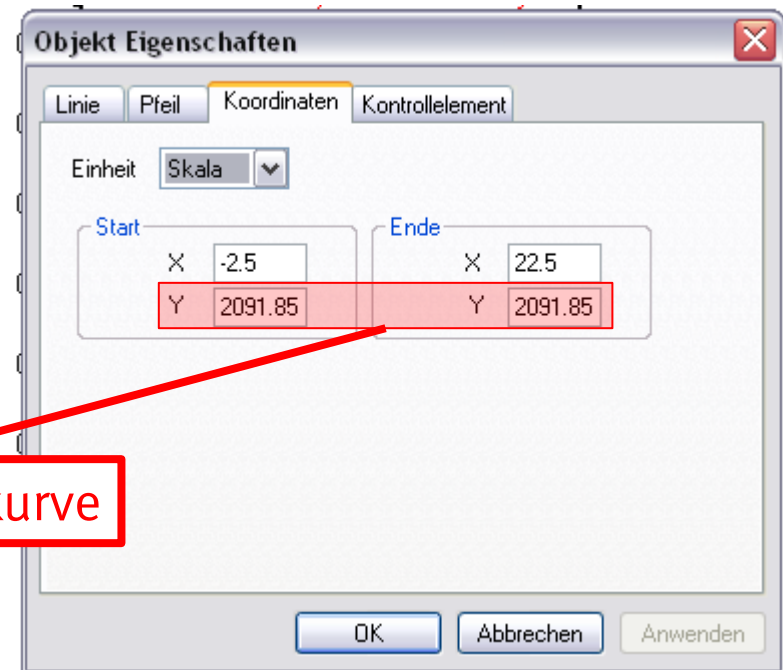
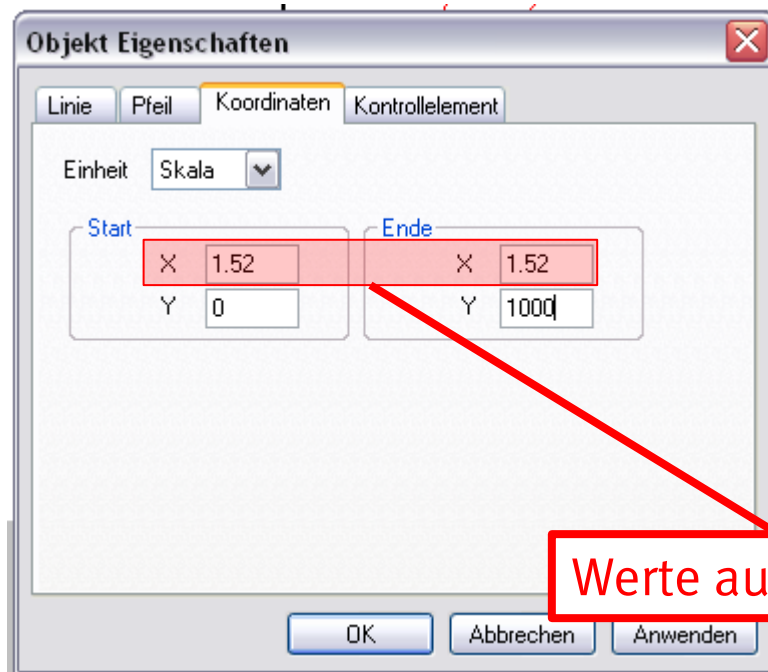


1. Linie zeichnen
2. Doppelklick auf Linie



Eine Line um die Michaelis-Menten-Konstante zu verdeutlichen.

Weitere Line für die maximale Reaktionsgeschwindigkeit.



Werte aus Fitkurve

