

[27] 谈冶雄,李万亥,姚真真. 依布硒林对四氯化碳及内毒素 + D₂ 氨基乳糖致肝损伤的保护作用[J]. 药理学,1999,34(2): 99-102.

[28] 雍政,何冰,董旭东,等. 有机硒对大鼠酒精性肝纤维化防护作用[J]. 武警医学院学报,2007,16(11): 30-32.

Origin 软件在药学研究数据作图中的应用

朱海涛¹,陈少秀²,蔡华¹,何秀丽¹

(鄖阳医学院附属太和医院 1. 药学部;2. 皮肤科,湖北十堰 442000)

[摘要] 目的 介绍一个药学研究中数据作图的实用软件。方法 引用文献资料举例介绍 Origin 软件绘制简单线形图形、绘制标准曲线、绘制复杂线形图形及三维图形的具体操作方法及应用。结果 Origin 软件在绘制图形方面使用方法简单,速度快捷,绘制出的图形科学、规范,能够显著提高工作效率。结论 Origin 软件是一个优秀的作图软件,可在药学研究中广泛应用。

[关键词] Origin 软件;药学;数据作图;应用

[中图分类号] TP319;R91 **[文献标识码]** A

[文章编号] 1004-0781(2008)09-1089-03

图形是一种形象化的表达方式,它可以直观、有效地表达复杂的数据,尤其是不同组数据间的比较、关联、趋势等。因而在科技论文及实验报告中经常用到。通常用柱图的高度表达非连续性资料的大小,用线图、直方图或散点图表达连续性或计量资料的变化。药学研究中有许多表示变化趋势的数据资料,尤其是连续的动态性资料,在论文中宜采用图的形式来表达,使读者容易理解文章所叙述事物的变化规律,补充文字叙述的不足,使其内容表达更合理,更完善。有部分药学研究论文中插图的绘制与编辑存在一些问题,主要表现为:插图缺乏科学性;插图绘制不规范;有些用手工绘制,图形不够美观^[1]。当前流行的可绘制图形的软件有 SAS、SigmaPlot、SPSS、Excel 等,这些软件功能强大,可满足科技工作中的许多需要,但使用这些软件有的需要一定的计算机编程知识和矩阵知识,有的需要熟悉其中大量的函数和命令,有的绘制的图形不够细致、美观,图表类型上也不够完整,对中文支持也不好。Origin 软件是美国 OriginLab 公司推出的基于 Windows 平台的数据分析和科技绘图软件,被公认为是最快、最灵活、使用最容易的数据分析和绘图软件,既可以满足一般用户的制图需要,也可以满足高级用户数据分析、函数拟合的需要。用其绘制出的图形科学规范,广泛应用于学术论文中。为使药学研究中制图方法有更多的选择,现以 Origin 7.5 为例,对其在药学研究中作图的应用作一介绍。

1 功能特点简介

Origin 具有两大类功能:数据分析和绘图。数据分析包括数据的排序、调整、计算、统计、曲线拟合等各种完善的数学分析功能。Origin 的绘图是基于模板,Origin 本身提供了几十种二维和三维绘图模板,用户也可以根据需要自己设置模板。绘图时,只要选择所需要的模板就行。可以和各种数据库软件、办

公软件、图像处理软件方便的连接。

Origin 采用直观的、图形化的、面向对象的窗口菜单和工具栏操作,全面支持鼠标右键、支持拖放式绘图等。Origin 是多文档界面应用程序。它将用户的所有工作都保存在后缀为 OPJ 的工程文件(Project)中,一个工程文件可以包括多个子窗口,如工作表窗口(Worksheet)、绘图窗口(Graph)、矩阵窗口(Matrix)、函数图窗口(Function Graph)、版面设计窗口(Layout page)等。各子窗口之间是相互关联的,可以实现数据的即时更新,即如果工作表中数据被改动之后,其变化能立即反映到其他窗口,比如绘图窗口中所绘数据点可以立即更新。子窗口可以随工程文件一起存盘,也可以单独存盘,以便其他程序调用。

Origin 可以在 Windows98、Windows2000、Windows XP 中使用,它们使用的最低配置为: Pentium II 以上 CPU,64 MB 内存,300 MB 硬盘空间。

2 在药学研究数据作图中的应用

2.1 文件的建立 打开 Origin 程序,单击主菜单中的 File(文件),File 下面弹出子菜单,在子菜单中选 new(新建)后按鼠标左键,窗口出现对话框,按其对话框中的要求建立自己的文件类型(Project,Worksheet,Graph 等),取名保存。

2.2 建立工作表 文件建立之后,屏幕上会有一个含有 A(X),B(Y)列的工作表(Worksheet),然后在表中填写数据(导入数据用 Import(输入)命令,选择菜单命令“File/Import/Single ASCII”)。也可先在 Excel 里把数据输入好,通过直接粘贴 excel 数据进来,这样就建立好一个工作表。

2.3 绘制图形

2.3.1 绘制简单线形图形 以文献[2]资料为例,绘制口服 100 mg 西洛他唑片后的时间药物浓度曲线。建立工作表之后,拖动鼠标选取所有的数据,点击屏幕下方的图形图标或单击主菜单中的 Plot(绘图)菜单,子菜单中将显示 Origin 可以绘制的各种图形,包括直线图(Line)、散点图(Scatter)、点线图(Line-Symbol)、特殊线/符号(special line/symbol)、向量图(Vector)、柱状图(bar)、饼图(Pie)、区域图(Area)、极坐标图(Polar)以及

[收稿日期] 2007-09-21 **[修回日期]** 2007-11-29

[作者简介] 朱海涛(1968-),男,湖北十堰人,副主任药师,学士,主要从事医院药学工作。电话:0719-8801393, E-mail: thz1261@sohu.com。

各种 3D 图表和统计用图表等。选取点线图,生成图形(图 1)。

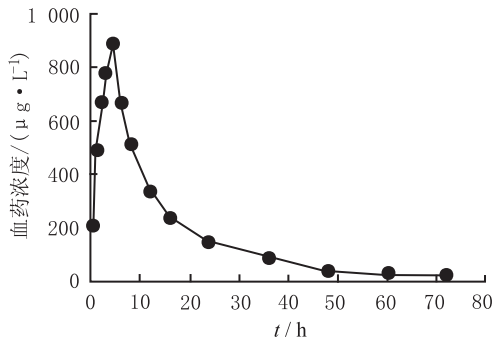


图 1 时间-药物浓度曲线

为了使绘制的图形更美观,可以更改程序默认的数据曲线及坐标轴的格式。更改数据曲线:将光标移向图中曲线或线型符号 B 双击鼠标左键,弹出一对话框,对话框中给出了线的颜色、粗细、线形和加数据标点的形状、大小、颜色等内容,根据需要选取。

更改坐标轴:单击菜单 Format(格式)选取 Axes Titles(轴标识)子菜单的 X axis title,可以输入 X 轴中文变量名,而且可以根据对话框中的设置改变字体的大小、字型和颜色。Y 轴的变量名操作同 X 轴。双击坐标轴,在弹出的对话框中选择相应选项卡,可以修改坐标轴的名称、颜色、粗细,可以设置坐标的起点值和终点值、步长以及坐标轴的类型。

2.3.2 绘制标准曲线 以文献[3]资料为例,绘制 1,8-二羟基蒽醌对照品溶液的标准曲线。

建立工作表之后,拖动鼠标选取所有的数据,点击屏幕下方的图形图标或单击主菜单中的 Plot(绘图)菜单,选取 scatter(散点图),生成图形。单击 analysis(分析)/Fit linear(线性拟合),绘出回归直线(图 2),可以得出线形回归方程: $Y = -0.01367 + 0.05179X, r = 0.99997$ 。

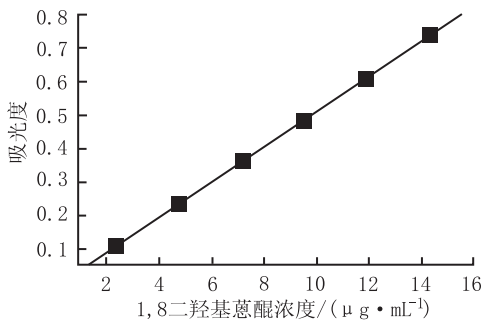


图 2 1,8-二羟基蒽醌对照品溶液标准曲线

2.3.3 绘制同一个坐标系下几个线形图形(几条曲线) 以文献[4]资料为例,绘制含不同浓度月桂氮草酮的双氯芬酸钠凝胶剂的累积透皮释放百分率-时间曲线。

首先要在数据栏里增加四列,操作步骤是单击主菜单 Column(列),弹出子菜单,单击其中 Add new columns(增加新列)之后,数据表中会增加列 C(Y)、列 D(Y)、列 E(Y)、列 F(Y),然后填上自己的数据,单击 Plot 选取线形就绘出图 3 所示的图形。5 条相似的线形可以用彩色区分开,在非彩色打印情况下可以在图形的线形上标出符号加以区分。操作步骤是双

击屏幕下方的 T,光标变成写文字的形状,把光标移到要标的线形位置按鼠标左键出现写文字或符号的对话框,输入符号就可以了。双击图例,可以改写图例说明的文字。双击曲线,可以选择线条的类型、颜色及数据点符号。绘出曲线后要使曲线平滑理想,单击 Analysis(分析)菜单弹出子菜单选取 Smoothing(平滑),其中 Smoothing 有三种拟合形式,根据需要选取(Origin 5.0 以上有曲线拟合功能)。

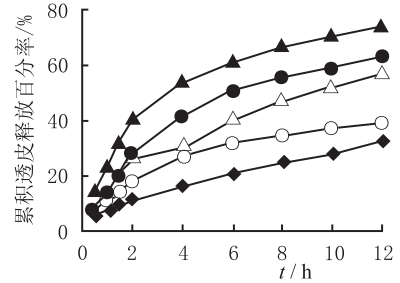


图 3 含不同浓度月桂氮草酮双氯芬酸钠凝胶剂的累积透皮释放百分率-时间曲线

—○—0%;—●—1%;—▲—2%;—◆—3%;—△—4%

2.3.4 绘制三维图形 以文献[5]资料为例,绘制 4 组大鼠血小板 CD40L 的表达情况三维条形图,见图 4。

建立工作表之后,拖动鼠标选取所有的数据,单击 3D graphs 工具条上的相应按钮,或单击主菜单中的 Plot(绘图)菜单,选取 3DXYY(三维 XYY)下面的 3D Bar(三维条形图)选项,生成图形,单击工具栏中 3D 工具,可以调整三维图形的旋转、倾斜角度。双击 Y 轴标题,修改为需要的名称。

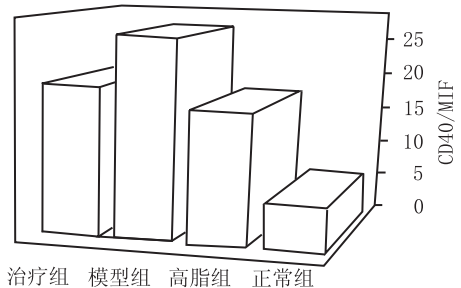


图 4 4 组大鼠血小板 CD40L 的表达情况

2.4 图形的导出 如需要把绘好的图形粘贴到 Word 文档中,只需激活绘图窗口(将图形中的汉字改成宋体或者仿宋,否则粘贴到 Word 文档中变成问号),单击菜单栏 Edit(编辑)/Copy Page(拷贝页面)就可以复制图像,再粘贴即可(或单击 File/Export Page(输出页面),把图形存为图像文件,再从 Word 文档中插入。在装有 Origin 的电脑中,Word 可以直接插入 Origin 图像,并可以在 Word 中通过双击这个图形调用 Origin 来编辑图片。插入方法:单击插入/对象,选择 Origin Graph,这将新建一个空白的 Origin 图形。或者利用插入/从文件创建,把以前作好的 Origin 文件插入进来。

2.5 模板的定制与应用 线的颜色、粗细、线形和数据标点的形状、大小、X、Y 轴上的刻度线(tick)朝向、轴标识及轴上的数字大小等内容,默认的不是我们想要的。因此每做一张图都要修改很多地方,比较麻烦。

在作完一张符合要求的图形以后,单击菜单栏 File/Save

Template As(另存模板为),自己给这个模板取个文件名。下次再作图的时候,只要选中要作图的数据,单击右键/Plot(绘图)/Template Library(模板库)/Category(类型)中选择 My Templates 下面的 Template(模板)选项,选择刚才保存的模板。这样一张符合要求的图就画好了。极大地节省了时间,避免了一些复杂的图表不断的重新创建。

3 结束语

以上主要是以线形图形绘制为例介绍 Origin 软件在药学研究数据作图中的应用。在药学研究中,线形图形应用的最多,广泛的应用 Origin 软件,可以提高绘图的效率。

利用 Origin 绘制的图形准确,色泽鲜艳,精美细致,不需做任何设置,即可达到发表出版的要求。与其他科技绘图及数据处理软件相比,Origin 在科技绘图及数据处理方面,能满足大部分科技工作者的需求,并且容易掌握,兼容性好,安装后占硬盘容量很小。

Origin 软件可以定制图形的每个部分,如曲线的线型和颜色、坐标轴的类型和名称等,便于对图形做出尽可能详细而合理的区分、标注和说明。保存为模板文件,方便以后的应用,节

省绘图时间。

Origin 软件除了能进行绘图操作外,还可以进行多种更为复杂的数据模拟与数值分析,对于既需绘制图形又要进行数据模拟或数值分析的数据非常合适。合理地利用 Origin 软件有助于减少数据处理时间,提高工作效率。

[参考文献]

- [1] 王昌栋. 中药科技期刊插图的编辑处理[J]. 中药材, 1998, 21(9): 481-483.
- [2] 杨燕萍, 温预关. 西洛他唑片的健康人体药动学研究[J]. 海峡药学, 2006, 18(1): 148-151.
- [3] 朱海涛, 陈吉炎, 兰 鸿, 等. 保肾胶囊的制备及含量测定[J]. 时珍国医国药, 2006, 17(4): 592-593.
- [4] 刘 荣, 闫 锋, 汪余疆, 等. 不同浓度的月桂氮草酮对双氯芬酸钠凝胶剂透皮吸收的影响[J]. 华西药学杂志, 2004, 19(4): 269-270.
- [5] 陆 雷, 张怀勤, 陈国荣, 等. 小檗碱对糖尿病模型大鼠血清血小板糖蛋白 GPVI 表达的影响[J]. 医药导报, 2007, 26(11): 1287-1291.

中国科学院院士张礼和教授受聘 担任《医药导报》杂志顾问

(本刊讯)经《医药导报》杂志主办单位中国药理学会和华中科技大学同济医学院附属同济医院推荐,受聘者本人同意,《医药导报》编辑部决定聘请中国科学院院士张礼和教授担任《医药导报》杂志顾问。

张礼和,1937年生,男,中共党员,江苏省扬州人。1958年毕业于北京医学院药理学系,1967年于北京医学院药理学系研究生毕业,1967~1981年任北京医学院助教、讲师,1981~1983年在美国弗吉尼亚大学化学系做访问学者;1983~1985年任北京医科大学药学院副研究员;1985~1999年任北京医科大学教授;1999年至今在北京大学药学院任教授。1995年当选为中国科学院化学学部院士。现为北京大学药学院教授、天然药物及仿生药物国家重点实验室学术委员会主任。

张礼和院士主要从事核酸化学及抗肿瘤、抗病毒药物方面的研究。自1990年以来系统研究了细胞内的信使分子cAMP和cADPR的结构和生物活性的关系,在此基础上发展了作用于信号传导系统,能诱导分化肿瘤细胞的新抗癌剂,发展了结构稳定、模拟cADPR活性,并能穿透细胞膜的小分子,成为研究细胞内钙释放机制的有用工具。系统研究了人工修饰的寡核苷酸的合成、性质和对核酸的识别,提出了酶性核酸断裂RNA的新机制,发现异核苷掺入的寡核苷酸能与正常DNA或RNA序列识别同时对各种酶有很好的稳定性,寡聚异鸟嘌呤核苷酸

有与正常核酸类似形成平行的四链结构的性质,发现信号肽与反义寡核苷酸缀合后可以引导反义寡核苷酸进入细胞并保持反义寡核苷酸的切断靶mRNA的活性,研究了异核苷掺入siRNA双链中去对基因沉默的影响,为发展基因药物提供了一个新途径。共发表论文200多篇;获得中国专利3项。

张礼和院士曾获日本Hoshi University名誉博士学位(1990年);美国密苏里-堪萨斯大学Edgar-Snow Professorship(1992年);何梁何利科技进步奖(1999年);国际药联(FIP)Millennium Pharmaceutical Scientists Award(San Francisco, USA)(2000年);国家自然科学基金二等奖(2004年)。兼任国务院学位委员会学科评议组药理学学科召集人;中国药学会副理事长;IUPAC, Organic & Biomolecular Chemistry委员会委员(Titular Member);英国皇家化学会高级会员(FRSC),亚洲药化学会主席(1998-1999)及“Organic & Biomolecular Chemistry”“Chem Med Chem”“Medicinal Research Review”和“Current Topics of Medicinal Chemistry”编委;《中国药物化学》杂志主编,《高等学校化学学报》副主编等职。

至此,《医药导报》编委会共有中国科学院院士和中国工程院院士6人。我们相信,在主办单位的正确领导下,在包括张礼和院士在内的编委会的指导下,《医药导报》各方面工作将更上一层楼。