

运用 Origin 软件处理药学实验数据

叶玉杰, 邱丘, 陈亚军, 张永忠, 刘嵩, 胡霞敏 (武汉科技大学医学院药理学系, 湖北 武汉 430065)

[摘要] 目的 介绍 Origin 软件, 以提高药物研发人员对实验数据的处理水平。方法 示例 Origin 软件运用于多个典型药理学实验数据的处理分析。结果 Origin 软件的数据分析和图形处理功能强大, 方便快捷, 结果准确; 据数据绘制的图层可获得直观且丰富的信息。结论 该软件在药学科研数据处理过程中有显著的应用价值。

[关键词] Origin 软件; 数据处理; 药学数据

[中图分类号] TP31 **[文献标志码]** A **[文章编号]** 1006-0111(2013)06-0436-03

[DOI] 10.3969/j.issn.1006-0111.2013.06.010

The application of Origin software in the data processing of pharmaceutical experiment

YE Yu-jie, QIU Qiu, CHEN Ya-jun, ZHANG Yong-zhong, LIU Song, HU Xia-min (Department of Pharmacy, Wuhan University of Science and Technology, Wuhan 430065, China)

[Abstract] **Objective** To introduce the Origin software to enhance the pharmaceutical R & D personnel's level of the experimental data processing. **Methods** The application of Origin software in the data processing of several classic pharmaceutical experiments was demonstrated. **Results** The capabilities of the data analysis and graphics processing with Origin software were very powerful, convenient and accurate. The graphs drawn according to the data were intuitive and rich information. **Conclusion** The software had significant value in data processing of pharmaceutical experiment.

[Key words] Origin software; the data handles; pharmaceutical data

Origin 软件是美国 Origin Lab 公司研制的一种易学、易用的计算机图形处理软件。与其他相关软件相比, 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, 并且易掌握, 兼容性好, 安装后占用空间很小, 因此成为科技工作者的首选科技绘图及数据处理软件^[1]。在药理学研究中需要对许多表示变化趋势的数据资料分析处理, 尤其是对连续变量的趋势分析处理比较复杂, Origin 软件能通过寻找变量与效应指标之间的拟合关系, 同时采用图的形式直观表达, 提供给药学科研人员准确、直观且丰富的数据信息。本文主要示例 Origin 软件运用于多个典型药理学实验的数据处理分析。

1 Origin 软件的基本操作

1.1 数据输入 在一个新的工程文件中, 默认打开一个 Worksheet 窗口, 该窗口缺省值为 2 列, 选 Column/Add New Columns, 在工作表中加入新的列。同时可以给各列命名。输入数据的方法与 Excel 相似, 也可以从外部导入数据。

1.2 数据分析 点 Statistics/Descriptive Statistics, 里面给出了选定各列或各行数据的各项统计参数, 如平均值 (Mean)、标准偏差 (Standard Deviation, SD)、标准误差 (Standard Error, SE)、总和 (Sum) 以及数据组数 N 。另外还可以对数据排序 (Sort)、快速傅立叶变换 (FFT)、多重回归 (Multiple Regression) 等, 可根据需要选择。

1.3 拟合功能 当绘出散点图或点线图后, 选择 Analysis 菜单中的 Fitting/Fit Linear 可对图形进行线性拟合。结果记录 (Result log) 中显示 R^2 (相关系数的平方)、SD (标准偏差)、 N (曲线数据的点数)、 P 值等。Origin 也提供了多种非线性曲线拟合方式: 多项式拟合、指数衰减拟合、指数增长拟合、S 形拟合、Gaussian 拟合和多峰拟合等。

2 软件应用实例

2.1 给药血药浓度曲线 以文献^[2]数据为例, 输入药物浓度-时间数据, 点击 plot/Line + Symbol 即可得药时曲线图 (图 1)。

2.2 不同规格药物溶出度曲线的比较 Origin 能进行同一坐标系下多条曲线的绘制, 以文献^[3]为例。输入数据第一列为时间, 后面各列为不同规格

[作者简介] 叶玉杰 (1980-), 男, 讲师。E-mail: yujieye@126.com.

[通讯作者] 胡霞敏。E-mail: huxiaming@163.com.

药物的溶出浓度,点击 Plot/Line + Symbol 即可得溶出度曲线见图 2。

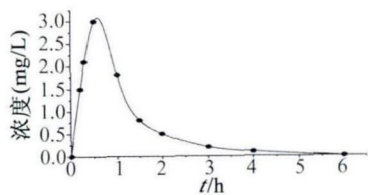


图 1 单剂量给药血药浓度曲线

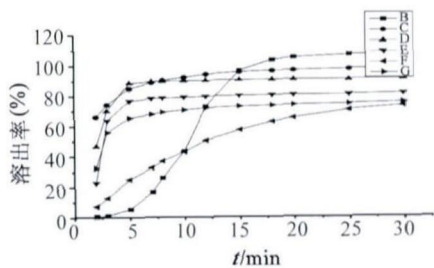


图 2 溶出度曲线

2.3 电位滴定法测定药物含量 电位滴定法确定终点的方法主要为图解法。图解法有 E-V 曲线法、 $\Delta E/\Delta V-V$ 曲线法和 $\Delta E^2/\Delta V^2-V$ 曲线法 3 种。以文献^[4]数据资料为例,Origin 提供了直接二次微分的方法和插值确定滴定终点。在 A(X),B(Y) 两列分别输入 E-V 两列数据,选择 Analysis/Mathematics/Differentiate,选择 Derivative Order 为 2,通过 Origin 软件计算出对应数据点的导数值,将其保存在名为 Derivative 的 Worksheet 中,绘制二阶微分曲线。图 3 示 $\Delta E^2/\Delta V^2-V$ 曲线。

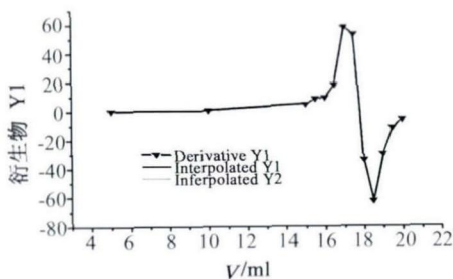


图 3 电位滴定二阶微分曲线

在 Graph 窗口,选择 Analysis/Mathematics/Interpolate/Extrapolate,打开对话框。分别输入 X_{min} 和 X_{max} ,即是插值运算时 X 的最小值和最大值,默认值为当前数据曲线的最小值和最大值。同时输入插值点数,即可在 Worksheet 中得到插值,重复插值操作,即可精确得到滴定终点。

2.4 柱状图及其误差的表示 以文献^[5]数据为例,在 A 列输入各实验组名称设为 X,在 Y 列输入相应血糖实验数据设为 Y。而各误差范围输入 C 列,右击菜单后,选择 Set as Y error,选定数据后,选择 Plot/Column/Bar/Stack Column 即得,见图 4。

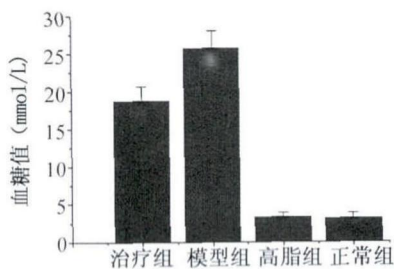


图 4 柱状图

2.5 药物的增溶相图 三元增溶相图在药剂学处方优化中常要用到。以文献^[6]数据为例,用 Origin 来绘制相图,输入数据时注意将数据分组(先不分组,绘制出散点图,据散点的分布情况再将数据分组),上一组数据与下一组数据之间留有一行或几行空格将每组数据隔开,使其在绘制相图曲线时形成分段曲线。每组数据中以一个固定组分 A(X)列自上而下进行 Sort worksheet 排列,否则不能形成正确的相图曲线。选中 A(X)、B(Y)、C(Z)三列,点 Plot/Specialized/Ternary,在三角图中出现各数据点。数据点的曲线连接,右击正三角形相图,选择 Plot Details,在 Plot Details 对话框中将 Plot Type 设置为 Line + Symbol,同时设置其他辅助参数,相图曲线可自动完整地绘制出来,见图 5。据相图可观察薄荷油在哪个区域可以形成透明的薄荷油溶液等相关信息。如果要预测一个已知的组成比例在相图什么区域,可以用分层添加图层的方法来完成。

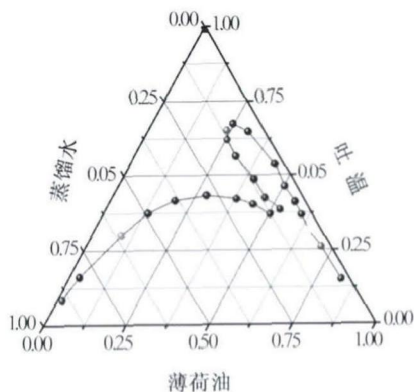


图 5 三元相图

(下转第 472 页)

门,不断更新制剂理念,紧跟时代步伐;不断更新制剂设备,完善制剂配制管理;不断开发制剂新品种、新剂型。只有在更新中求发展,在完善自我中求生存,才能在医院的发展进程中经久不衰,在医院药学中起到中流砥柱的作用。

【参考文献】

[1] 向延付. 探讨制剂室的发展之路[J]. 中医药导报, 2011, 17(2): 107.
 [2] 张 荣, 王庆芬, 陈根光, 等. 军队医院制剂室管理现状与对策[J]. 解放军医院管理杂志, 2011, 18(12): 1188.
 [3] 中国人民解放军总后勤部卫生部, 中国人民解放军医疗机构制剂规范[S]. 北京: 人民军医出版社, 2003: 121.

[4] 曲桂霞, 谷继卜, 李 楠. 我院制剂室的存在和发展[J]. 黑龙江医药科学, 2011, 34(4): 110.
 [5] 陈 霞. 重视制剂室在药学服务中的作用[J]. 实用药物与临床, 2010, 13(3): 239.
 [6] 赵汉臣, 李连新, 曲国军, 等. 医院制剂室的作用与发展对策[J]. 药学实践杂志, 2008, 26(5): 383.
 [7] 樊 蓉, 张 纯, 叶朝阳. 高浓度枸橼酸钠注射液在血液透析应用中的研究进展[J]. 中国血液净化, 2006, 5(4): 208.
 [8] 李康峰, 周玉坤, 章 亮, 等. 高浓度枸橼酸钠抗凝在维持性血液透析中的安全性探讨[J]. 临床肾脏病杂志, 2011, 11(3): 114.

[收稿日期] 2012-08-17

[修回日期] 2012-10-06

(上接第 437 页)

2.6 3D 图 绘制 3D 图是比较复杂的, 药学研究中对连续变量的优化多采用星点设计-效应面法, 通过效应面和二维等高线上直接观察较优区域, 优选出变量的最佳取值范围。以文献^[7]中数据为例, 输入数据, 点 Worksheet/Convert to matrix/Gridding, 设置恰当的参数得到 Gridding Matrix 数据窗口, 点 Plot/Contour/Contour-Color Fill 得到二维等高线(图 6); 通过 Plot/3D Surface/Color Map Surface 得到效应面三维图(图 7)。

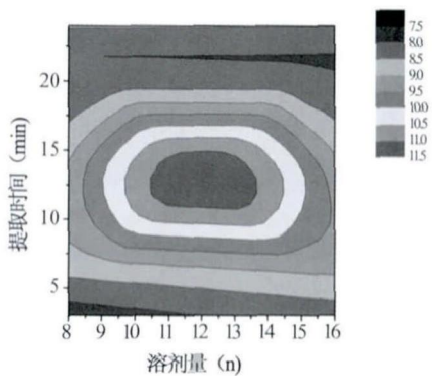


图 6 二维等高线

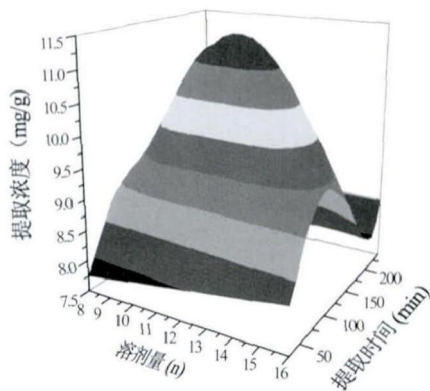


图 7 效应面三维图

3 结语

运用 Origin 软件可以将几组数据放在一个图形中进行处理, 亦可以对图形进行分析处理。药学是一个实验性学科, 因此涉及到相对多且复杂的数据处理。在文献^[8]中亦介绍 Origin 在药学研究中的一些简单应用。本文主要示例 Origin 软件处理药学科研中的一些复杂数据处理分析, 可以看出运用 Origin 处理数据方便快捷, 得到的相关信息量亦丰富。关于 Origin 软件运用方面的论文^[9,10]逐渐增多, 其应用价值正逐步得到更多科研工作者的肯定。

【参考文献】

[1] 叶卫平, 方安平, 于本方. Origin 7.0 科技绘图及数据分析[M]. 北京: 机械工业出版社, 2003: 11.
 [2] 金 锐, 孙考祥, 王珍, 等. 单剂量口服奥扎格雷钠在健康人体的药代动力学[J]. 中国临床药理学杂志, 2006, 22(1): 47.
 [3] 王绯, 任重远, 周 怡, 等. 辛伐他汀片的实时溶出度对比分析研究[J]. 药物分析杂志, 2008, 28(3): 506.
 [4] 马俊贤, 宋丽英, 李素娟, 等. 两点电位滴定法测定维生素 B₁[J]. 分析化学研究简报, 1999, 27(4): 453.
 [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.
 [6] 崔福德. 药剂学实验[M]. 北京: 人民卫生出版社, 2006: 104.
 [7] 韦文俊, 刘艳平. 星点设计-效应面法优选碧血草中贝矛醇的水提工艺[J]. 中药材, 2009, 32(6): 972.
 [8] 朱海涛, 陈少秀, 蔡 华, 等. Origin 软件在药学研究数据作图中的应用[J]. 医药导报, 2008, 27(9): 1089.
 [9] 周郁斌, 袁中文, 李海刚, 等. 用 Origin 软件计算药物溶出度 Weibull 分布参数[J]. 医药导报, 2011, 30(6): 721.
 [10] 樊 玲, 尚贞锋, 武丽艳. Origin 软件在物理化学实验中的应用[J]. 大学化学, 2011, 26(2): 41.

[收稿日期] 2012-11-20

[修回日期] 2013-05-24