В разделе Sample мы пишем через запятую lab\_code и растворитель.

В разделе Comment мы пишем через запятую концентрацию, желаемую температуру и тип эксперимента (“Static”, “Dynamic”, “Reference”). Если тип эксперимента не указан, то он будет обозначен как Static автоматически.

Растворители зовутся вот так (без кавычек, конечно):

"NA", "Water", "EtOH", "MeOH", "tBuOH", "iPrOH", "Et2O", "THF", "DCM", "CHl3", "DCE", "DMF", "DMSO", "CH3CN", "Acetone", "AAAAAA"

NA - для кристаллического стандарта.

AAAAAA - в случае если растворитель не указан, то ставится именно это.

В принципе, если растворителя нет, в этом списке, то он автоматически к нему добавится. Список нужен, чтобы не плодить сущностей.

Пример поля Sample - PN0378A, DCM

Пример поля Comment - 0.01, 36.6, Static

Если крато пробежаться по содержимому файлов:

supramers.sqlite - Сама база данных, может быть просмотрена с помощью DB Browser for SQLite ([http://sqlitebrowser.org](http://sqlitebrowser.org/)). Мне, вроде бы, удалось настроить поддержку русского языка в базе. Названия в базе данных не чувствительны к регистру (большие/маленькие буквы).

SQL\_functions.R - Куча фунций по работе с базой данных, лучше туда вообще не лезть :) Без планов и схем базы там сам чёрт ногу сломит (схема базы приложена).

Data\_IO.R - Функции посвящённые загрузке-выгрузке данных в базу данных. Разбор файла на части и формирование запросов к базе. Сюда уже можно, но осторожно.

Genesis.R - Служебный файл, который создаёт пустую базу данных, и заполняет поля. Используется только для автоматизации действий на стадии разработки программы.

Output.R - Рисует картинки и записывает данные в csv. Можно править :)

Calculations.R - Здесь лежат функции для расчёта. Её и надо использовать и её так же как и Output.R можно править.

Списко доступных на данный момент функций:

add\_comp(name, mw, lab\_code) pol\_alpha\_conc(foldername, alphaud, code, pass, size, aver, steps, type, error)

pol\_alpha\_time(foldername, alphaud, code, pass, size, aver, steps, type, error)

pol\_alpha\_temp(foldername, alphaud, code, pass, size, aver, steps, type, error)

pol\_temp\_time(foldername, code, pass, size, aver, steps, type)

Теперь о том, что есть что в этом зоопарке. Собственно, из названия функций всё более-менее ясно:

add\_comp - необходимо запускать только в случае использования нового кода исходного вещества. Указываются, через запятую: название вещества (вроде бы, можно и по-русски), молекулярный вес и код исходного вещества. Записывает новое вещество в базу данных.

pol\_alpha\_conc - альфа от концентрации. В итоге выдаёт график и табличку.

pol\_alpha\_time - альфа от времени. В итоге выдаёт график.

pol\_alpha\_temp - альфа от температуры. В итоге выдаёт график.

pol\_temp\_time - температура от времени. В итоге выдаёт график.

Теперь по параметрам этих функций:

foldername - ("data") указывается название папки из которой загружаются файлы. Неободимый параметр только для !!!первого!!! считывания файлов. В дальнейшем программа всё равно будет брать данные из базы.

code - ("OA0958") номер эксперимента. Основываясь на этом параметре программа делает выборку из базы данных. По умолчанию она берёт только файлы у которых параметр type указан как "static". !!!Либо foldername, либо code обязательно должен быть указан!!!

type - ('static', 'dynamic', 'reference', 'wash', 'empty') Параметр с помощью которого можно изменить настройки выборки типов файлов из базы. По умолчанию "static"

alphaud - (TRUE/FALSE) по умолчанию стоит FALSE. Собственно говоря, указывает считать ли удельную альфу или нет.

pass - количество точек с начала каждого анализа, которые не учитываются (по умолчанию 0)

size - количество точек которые берутся в расчёт (по умолчанию все точки)

aver - блоки по сколько точек надо усреднять (по умолчанию не усредняет)

steps - может отбирать каждую n-ю точку (по умолчанию берёт все точки)

error - (TRUE/FALSE) по умолчанию стоит TRUE. Рисовать ли разброс на графике.

Update: Совсем забыл сказать. Для того чтобы внести в базу старые файлы (те где поля "Sample name" и "Comment" не заполнены должным образом) надо воспользоваться функцией import\_pol(folder, type, concentration, path, temper, solvent, lab\_code) из фала Data\_IO.R в которой можно указать все эти поля самостоятельно.

Во всех расчётных функциях появился параметр shift (TRUE/FALSE по умолчанию он FALSE) который отвечает за эту фишку. Желательно при этом задавать параметры pass и size, если ты их не задашь, тогда pass будет равен 900 (т.е. 15 минут), а size будет равен остатку времени до конца файла.

Цифру отвечающую за этот сдвиг надо вводить в конце поля Sample name. Если её не написать она пропишется как 0. Естественно, всё это можно вручную ввести через функцию import\_pol. Ну и я ещё прикрутил создание csv фалов во всех функциях.https://ssl.gstatic.com/ui/v1/icons/mail/images/cleardot.gif

Добавился параметр exclude который принимает в себя вектор с именами  
файлов, которые ты хочешь удалить из выборки.

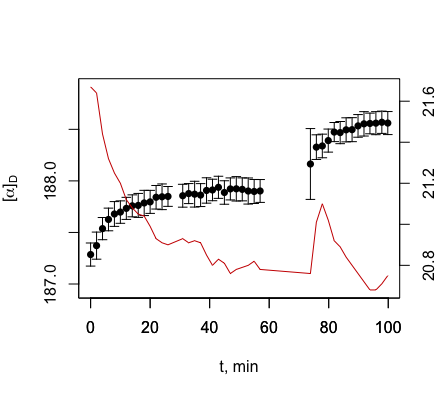
а у меня работает вот так: pol\_alpha\_conc(alphaud = TRUE, code = c("OA0954", "OA0955", "OA0956", "OA0957", "OA0958", "OA0960", "OA0963", "OA0964"), pass = 900, size = 100, exclude = c("OA0955A.csv"))

и вот так: pol\_alpha\_conc(alphaud = TRUE, code = c("OA0954", "OA0955", "OA0956", "OA0957", "OA0958", "OA0960", "OA0963", "OA0964"), pass = 900, size = 100, exclude = "OA0955A.csv")

Появился новый параметр y\_lim. Как водится, его можно указывать, а можно и не указывать. Выглядит его задание следующим образом y\_lim = c(80, 95) в скобках у вектора минимальное и максимальное значение по оси y.

Соотношение сторон графика задаётся при экспорте картинки, я завтра покажу как именно это выглядит.

Там в OneDrive появился файл SandBox.r там будут жить всякие штуковины, которые ещё не допилены до той стадии, чтобы их скопировать в основные файлы



Но как убрать крышку с графика я пока не знаю

можешь поиграться в SandBox лежит функция pol\_alpha\_time\_2 Которая и рисует такие графики

рисует только для удельного вращения