

フィッティングの方法

Excel でフィットを行う場合には、変数セルや目的セルなど事前に準備するものがいくつかあり手間がかかりますが、Origin では元データ（もしくはグラフ）があればそのままフィットに使う関数を選択してフィットを実行できます。ここでは同じデータに対してフィットを行う手順を Origin と Excel で比較してご紹介します。今回は Origin に標準で組み込まれている Gauss 関数でフィットさせる場合の手順を比較します。

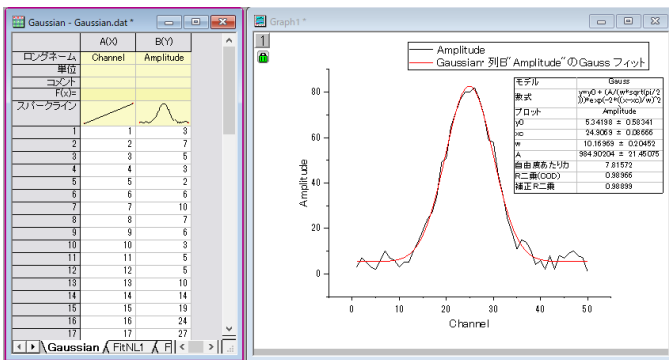
Gauss 関数についてはこちらからどうぞ

<https://www.originlab.com/doc/Origin-Help/Gauss-FitFunc>

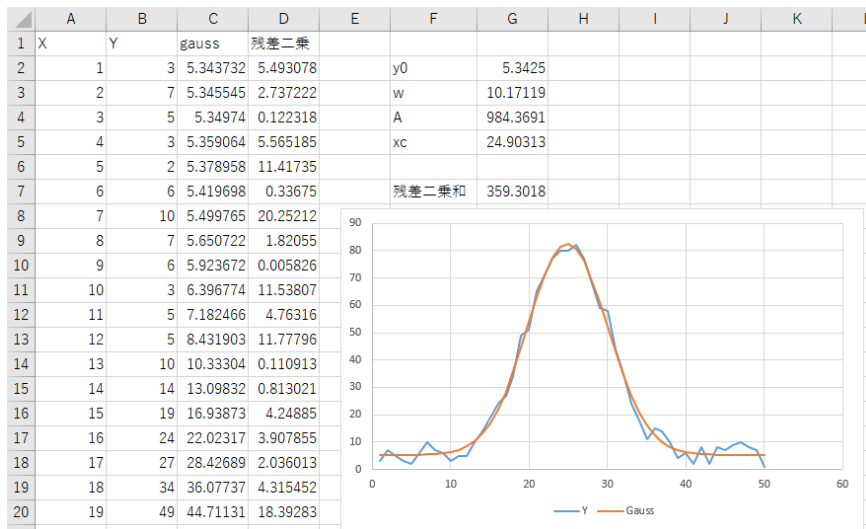
$$y = y_0 + \frac{A}{w\sqrt{\pi/2}} e^{-2\frac{(x-x_c)^2}{w^2}}$$

※使用した各ソフトウェアのバージョン：Origin 2021b、Excel 2016

Origin

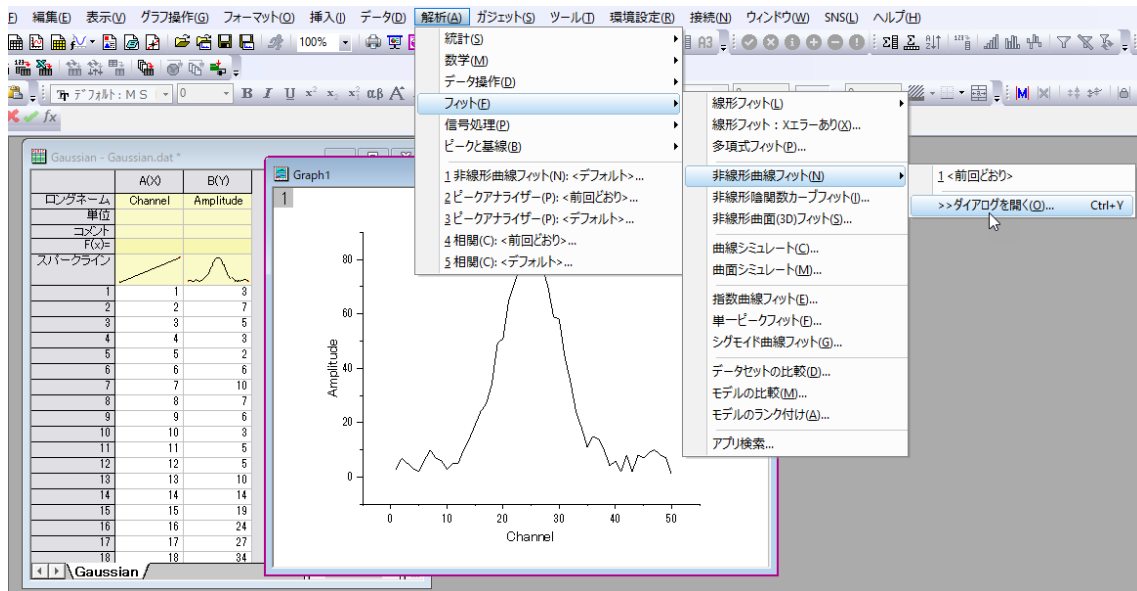


Excel

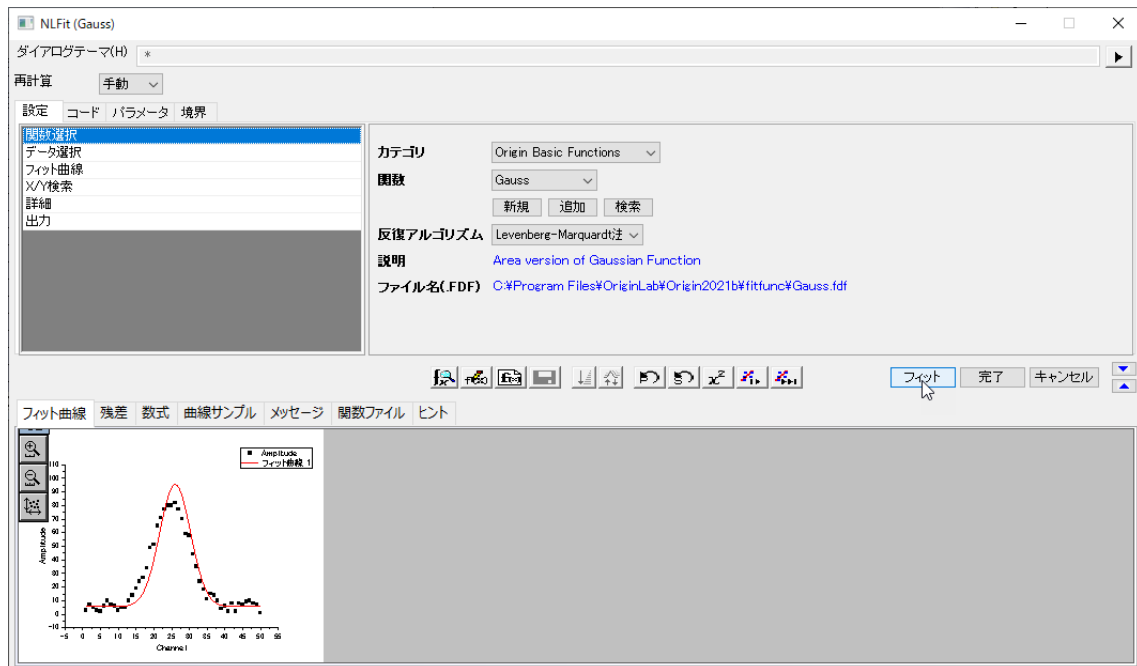


Origin

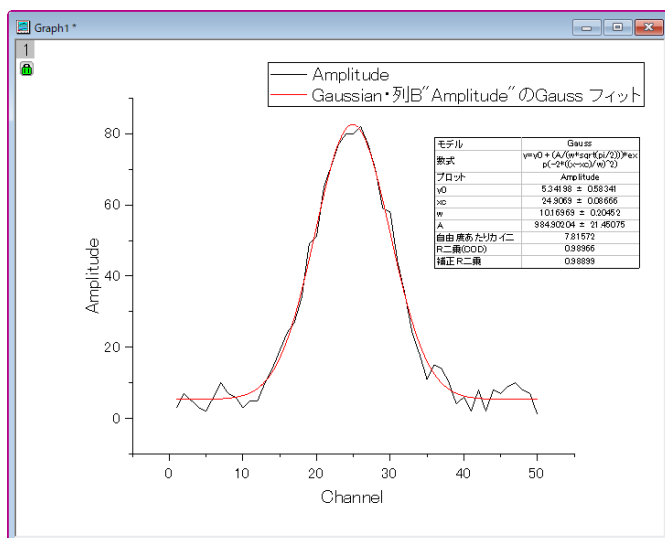
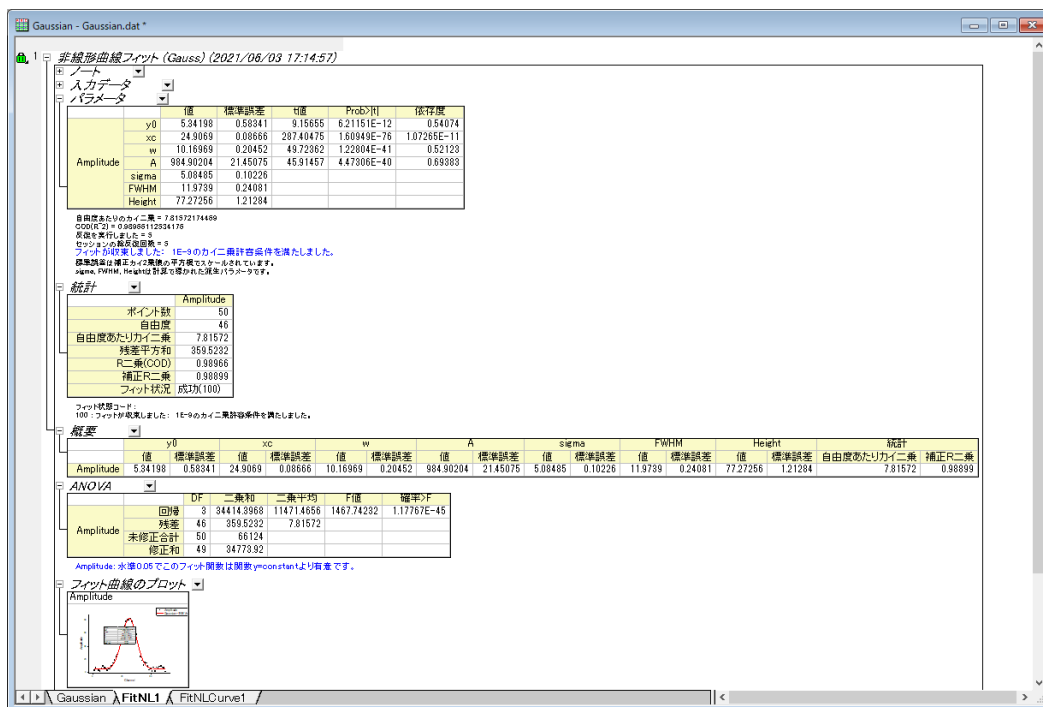
1.元データから作成したグラフのウィンドウを選択し、メニューから「解析」の「フィット」の「非線形曲線フィット」 でダイアログを開きます。



2.開いたダイアログでカテゴリは「Origin Basic Functions」のまま、関数を「Gauss」にセットして中央右側にある「フィット」ボタンをクリックするとフィットが実行されます。



3.フィットが完了し、パラメータの値や統計値などがまとめて見られるレポートシートが出力されます。また、グラフにもフィット曲線が自動的に追加されます。



終了

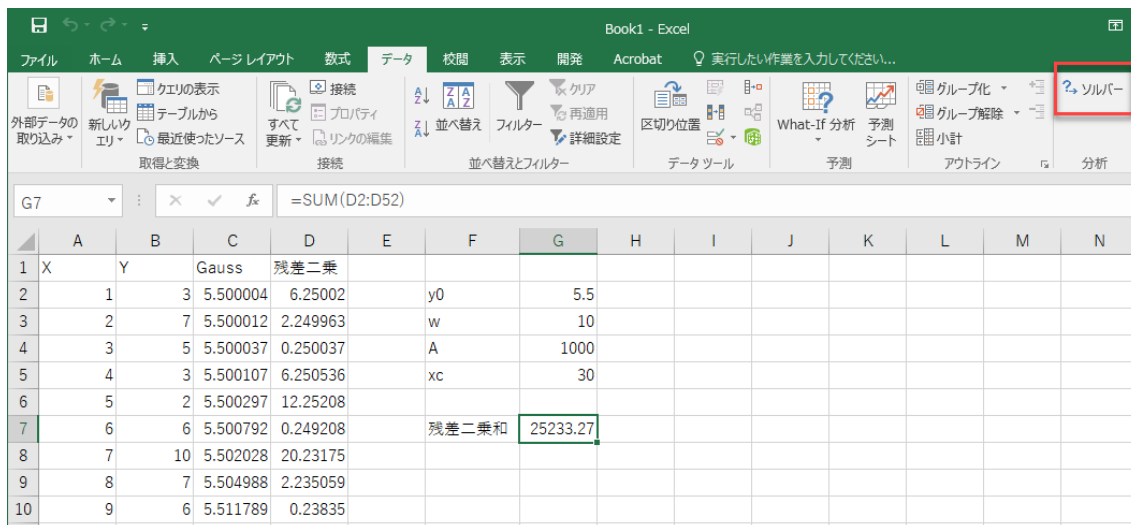
3. Gauss 関数のデータ列と元データの残差の二乗を出します。

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	X	Y	Gauss	残差二乗					
2		1	3	5.500004	6.25002	y0	5.5		
3		2	7	5.500012	2.249963	w	10		
4		3	5	5.500037	0.250037	A	1000		
5		4	3	5.500107	6.250536	xc	30		
6		5	2	5.500297	12.25208				
7		6	6	5.500792	0.249208				
8		7	10	5.502028	20.23175				
9		8	7	5.504988	2.235059				
10		9	6	5.511789	0.23835				

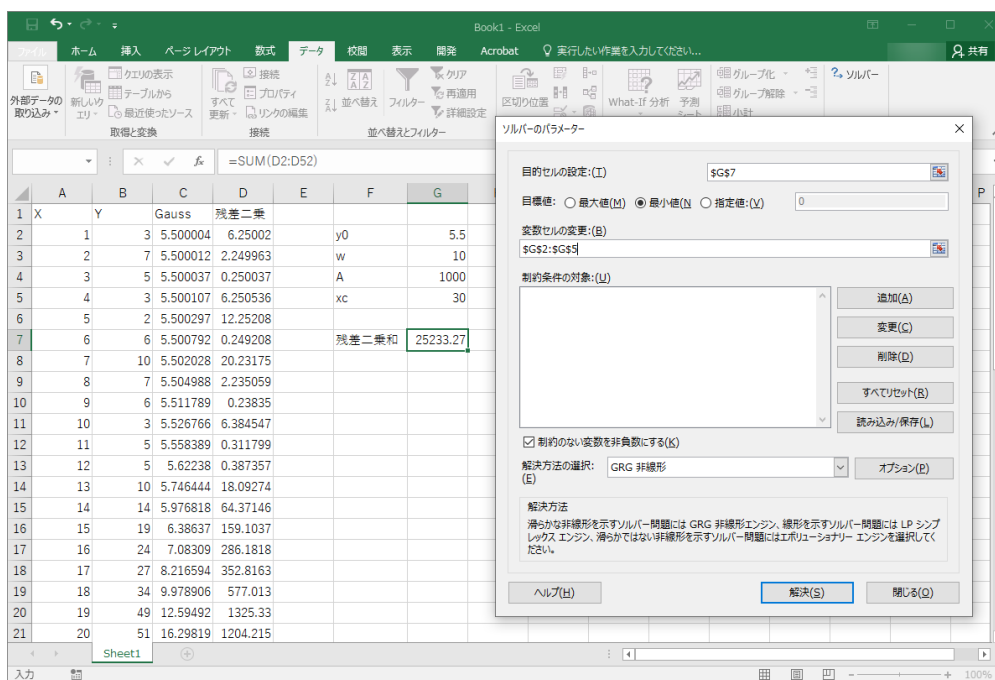
4. 残差の 2 乗の総和を求めます。

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	X	Y	Gauss	残差二乗							
2		1	3	5.500004	6.25002	y0	5.5				
3		2	7	5.500012	2.249963	w	10				
4		3	5	5.500037	0.250037	A	1000				
5		4	3	5.500107	6.250536	xc	30				
6		5	2	5.500297	12.25208						
7		6	6	5.500792	0.249208		残差二乗和	25233.27			
8		7	10	5.502028	20.23175						
9		8	7	5.504988	2.235059						
10		9	6	5.511789	0.23835						

5. Excel 上部のタブから「データ」タブに移動し、「ソルバー」を選択します。



6. 目的セルに残差二乗和のセルを、目標値を「最小値」に、変数セルをパラメータのセルに設定してあとはデフォルトのまま「解決」ボタンをクリックします。



7. 「ソルバーによって解が見つかりました。」と表示されれば OK です。レポートが必要な場合にはレポートの中にある必要な項目を選択して「OK」でダイアログを閉じます。

ソルバーの結果

ソルバーによって現在の解に収束されました。すべての制約条件を満たしています。

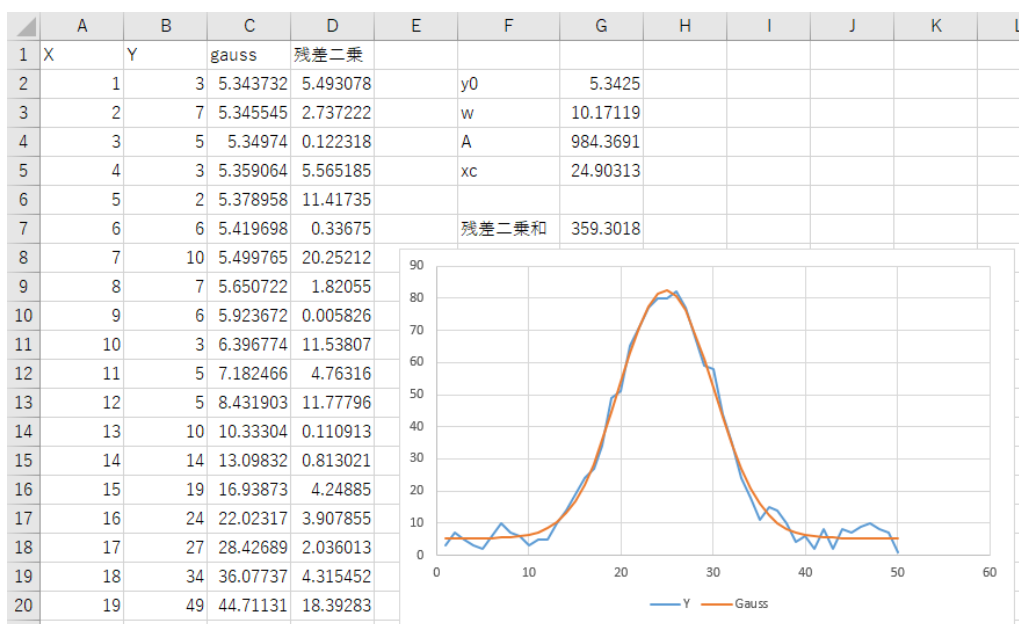
ソルバーの解の保持
 計算前の値に戻す

ソルバー パラメーターのダイアログに戻る
 アウトライン レポート

ソルバーによって現在の解に収束されました。すべての制約条件を満たしています。
 ソルバーで反復計算を 5 回実行しましたが、目的セルが有意に移動しませんでした。収束の設定値を小さくするか、開始点を変更してください。

レポート
解答
感度
条件

8. Gauss 関数のデータ列の値がフィットしたときの値に書き換わったので、これと元データをグラフにプロットすると下図のようになります。



終了

まとめ

Excel では毎回関数を作成する必要がありますが、Origin にはよく使われる関数があらかじめ組み込まれているので、作業時間を短縮できます。また、グラフからフィットすれば自動でグラフ上にフィット曲線も追加される点も便利です。

なお、Origin でも、自分で定義した関数でのフィットが可能です。また、パラメータの値の範囲やパラメータ同士の関係を設定してフィットを実行することや、複数データでフィットを実行する場合にパラメータを共有することもできます。

詳細は下記ページをご参照ください。

https://www.lightstone.co.jp/origin/whats_origin/curve_fitting.html

(補足 1) Origin ではグラフがない状態でもフィットさせたいデータ列を選択した状態でメニューから「解析」の「フィット」の「非線形曲線フィット」を同様に行いますとフィットが実行できます。(グラフはレポートシート内のもののみになります。)

(補足 2) Origin では初期値を設定する場合、関数を設定したあと「フィット」ボタンを押す前に「パラメータ」タブに移動して値の列を変更することでパラメータの初期値を変更できます。

また、Origin では自動的に初期値を計算してくれる機能がありますので、フィットごとに毎回設定せずともフィットを実行できます。

No.	パラメータ	意味	固定	値	誤差	依存度	下側信頼水準	上側信頼水準	有効桁数	初期式
1	y0	offset	<input type="checkbox"/>	5.68333	--	--	--	--	System	<input checked="" type="checkbox"/>
1	xc	center	<input type="checkbox"/>	26	--	--	--	--	System	<input checked="" type="checkbox"/>
1	w	width	<input type="checkbox"/>	8.66585	--	--	--	--	System	<input checked="" type="checkbox"/>
1	A	area	<input type="checkbox"/>	976.41667	--	--	--	--	System	<input checked="" type="checkbox"/>