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

	А	В	С	D	E	F	G	н	1	J	K	L
1	X	Y	gauss	残差二乗								
2	1	3	5.343732	5.493078		y0	5.3425					
3	2	7	5.345545	2.737222		w	10.17119					
4	3	5	5.34974	0.122318		A	984.3691					
5	4	3	5.359064	5.565185		хс	24.90313					
6	5	2	5.378958	11.41735								
7	6	6	5.419698	0.33675		残差二乗和	359.3018					
8	7	10	5.499765	20.25212	90							
9	8	7	5.650722	1.82055	80			\sim				
10	9	6	5.923672	0.005826	70		/	$\langle \rangle$				
11	10	3	6.396774	11.53807	70							
12	11	5	7.182466	4.76316	60			h				
13	12	5	8.431903	11.77796	50							
14	13	10	10.33304	0.110913	40							
15	14	14	13.09832	0.813021	30							
16	15	19	16.93873	4.24885	20							
17	16	24	22.02317	3.907855	10				N	.~~	_	
18	17	27	28.42689	2.036013	0	$\sim \sim$				VV	7	
19	18	34	36.07737	4.315452		0 10	20	30	4	0	50	60
20	19	49	44.71131	18.39283				Ү	Gauss			
~												

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。

E) 編集(E) 表示(V) グラフ操作(G) フォーマット(Q) 挿入(I) データ(D)	解析(A) ガジェット(S) ツール(D) 環境設定(R) 払	接続(N) ウィンドウ(W) SNS(L) ヘルプ(L	Ð
	統計(S) 数学(M) ブーク操作(D) ブークした基線(B)	R3 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2	▓╺≞╺ऻॿॏॖऀ┊Ӎ⋈╵ः⇔҂ा⋈∊ ▓╺≞╺ॿॏॖऀ┊Ӎ⋈╵ः⇔҂ा⋈∊
ACX01 ACX02 B(Y) □ングネーム Charnel Amplitude 単位	1非線形曲線フィット(N): <デフォルト> 2ビークアナライザー(P): <前回どおり> 3ビークアナライザー(P): <デフォルト> 4相関(C): <前回どおり> 2相関(C): <デフォルト> 10 20 30 40 50	非線形曲線フィット(い) ・ 非線形曲閣数カーブフィット()… ・ 非線形曲閣(3D)フィット()… ・ 曲閣シミュレート()… ・ 地閣シミュレート()… ・ 地獄ショント()… ・ 地獄ショント()… ・ 単一ビークフィット()… ・ ジゲモイド曲線フィット()… ・ データセットの比較(0)… ・ モデルのた数(0)… ・ モデルのうンク付け(ム)… アカリ検索…	<u>1 <前回どおり></u> >>ダイアログを聞く(<u>Q</u>) Ctrl+Y

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。

NLFit (Gauss)		- 🗆 🗡	<
ダイアログテーマ(H) *		•	•
再計算 手動 ~			_
設定 コード バラメータ 境界			
関防道沢 データ選択 フィット曲線 X/Y検索 詳細 出力	カテゴリ Origin Basic Functions ↓ 開設 Gauss ↓ 新規 〕追加 検索 反復アルゴリズム Levenberg-Marquardt注 ↓ 説明 Area version of Gaussian Function ファイル名(FDF) C:¥Program Files¥OriginLab¥Origin2021b¥fitfunc¥Gauss.fdf		
		7 キャンセル	•
フィット曲線 残差 数式 曲線サンプル メッセージ 関数	ファイル ヒント		

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。

🖽 Gaussian - Gaussian.dat *	- • •
▲ 1 = 非結核即線フィット (Cause) (2021/06/03 17:1457)	^
$\begin{bmatrix} y & y & y \\ y & y & y \\ y & y & y \\ y & y &$	
通信 構築等換差 1個 Prob/11 化長子目 y0 5.41186 0.5585 6.21155-12 5.4074 xc 24.3699 0.08686 227.40475 15.09482-76 10.7255-11 w 10.16896 0.20452 142.2024 12.2264E-74 10.7255E-11 Amplitude A 984.90244 12.145075 14.531457 14.5716 6.53128 eiemo 50.44845 0.0226 14.2306E-40 0.53983 14.551457 14.7306E-40 0.53983 eiemo 50.4485 10.0226 12.244 14.7306E-40 15.57128	
自選家たいのかく二集 - 7 3157271496 COD(72) - 0.0866115231715 及戦を発行しまな3157 の数でを対応していた。 アインやわれて見るした。11 - 0 - 00 カイニー無許容点件を増充しました。 建築気能の調査のよりた。11 - 0 - 00 カイニー無許容点件を増充しました。 建築気能の調査のよりた。11 - 00 - 00 - 00 - 00 - 00 - 00 - 00 -	
<i>読計</i> ・イント数 ・白田度 ・白田度 ・白田度 ・白田度 ・白田度 ・日田度 ・日田度 ・日田度 ・日田度 ・・ ・日田度 ・・ ・・ ・・ ・・ ・・ ・・	
L A Sigma FWHM Height Sigma S	
	二乗 補止R二乗 572 0.98899
ANOUA UF 一般和 二角十50 File W#F>F 回時 8 34413368 114714556 116774232 117767E-45 Amplitude 時度者 6 3858232 7.81572 117767E-45 Amplitude 時度者 6 3858232 7.81572 117767E-45 Amplitude 現在者 49 2477332 1 Ampstude: 米市のちて、つアップト開催は 148 148 148	
✓ Gaussian à FitNL1 & FitNLCurve1 /	. ∢



Excel の場合

1.元データと Gauss 関数のパラメータ用のセルを用意します。	
-----------------------------------	--

	А	В	С	D	E	F	G	Н	I
1	Х	Y							
2	1	3				у0	5.5		
3	2	7				w	10		
4	3	5				A	1000		
5	4	3				хс	30		
6	5	2							
7	6	6							
8	7	10							
9	8	7							
10	9	6							
11	10	3							
12	11	5							

2.パラメータの値を使った Gauss 関数のデータ列を作成します。

6	3	ئ ہے								Book1 -	Excel			
יד	イル	π·	-4	挿入	ページレイア	까ト 数式	こ データ	校閲	表示 開発	é Acroba	t ♀実	テしたい作業を入	力してください	
し 貼り クル	付け プボ・	են հ են են են են են են են են են են են են են	游: B	ゴシック I <u>U</u> ・	י שיין אראב אראב	11 • A [*]		= ≫· = •= •= 配置		≇ ▼ % ♪ 「 数値	▼ ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ●	(美) デーブルと た付き テーブルと 式 * 書式設定 スタイル	して セルの こで スタイル *	翻挿入 ■ 副 書式 セル
C2	,		-	: ×	✓ f _x	=\$G\$2-	+\$G\$4*EX	P(-2*POW	/ER(\$A2-\$(G\$5,2)/(\$G	\$3*\$G\$3))/(\$G\$3*SQ	RT(PI()/2))
		A		В	С	D	E	F	G	Н	I.	J	К	L
1	Х		Y		Gauss									
2			1	3	5.500004			y0	5.5					
3			2	7	5.500012			w	10					
4			3	5	5.500037			А	1000					
5			4	3	5.500107			хс	30					
6			5	2	5.500297									
7			6	6	5.500792									
8			7	10	5.502028									
9			8	7	5.504988									
	1		~	~	E 544700									

l	ਜ਼ ਾ ⊲							Book1	- Excel	
ファ	イル ホー	ム 挿入	ページレイ	Pウト 数式	む データ	校閲	表示 購	発 Acrob	at Qj	【行したい
Rhip	*	游ゴシック		11 • A	= =	≡ ॐ*	₽ ¢	[進		≠
増り	- 1 007	B I <u>U</u> -	🗄 🖌 🖄	• <u>A</u> • <u>7</u>	· = =	≣€≣	Ē	• % •	€.0 .00 ≯ .00 →.0	िमिशिट 書式 ▼
クリッ	ップボード 「ュ		フォント		Fa	配置	ra	数値	ra	
D	2 *	· : ×	$\checkmark f_x$	=POWE	ER(\$B2-\$C	2,2)				
	А	В	С	D	E	F	G	н	1	
1	Х	Y	Gauss	残差二乗						
2	1	3	5.500004	6.25002		y0	5.	5		
3	2	7	5.500012	2.249963		w	1	0		
4	3	5	5.500037	0.250037		А	100	0		
5	4	3	5.500107	6.250536		хс	3	0		
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						

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。

4.残差の2乗の総和を求めます。

E	5 •		÷						Book1 - Ex	cel		
ידר	イルオ	1-7	挿入	ページレイブ	やた 数式	データ	校閲	表示開発	Acrobat	♀ 実行し	たい作業を入力	してください
脂り	■	游: B	ゴシック I <u>U</u> ・	<u>&</u>	· 11 · A A · ∡	 ▲ = = • = =	= ≫· = •≡ •≡	<	%° * €.0	▼ .000 .000 条件付: 書式、	き テーブルとして	て セルの マ スタイル マ
クリッ	プボード ロ			フォント		E.	配置	Fa	数値	r <u>a</u>	スタイル	
Gī	7	-	: ×	$\checkmark f_x$	=SUM(D2:D52)						
	А		В	С	D	Е	F	G	н	I.	J	К
1	Х	Y	·	Gauss	残差二乗							
2		1	3	5.500004	6.25002		y0	5.5	i			
3		2	7	5.500012	2.249963		W	10)			
4		3	5	5.500037	0.250037		Α	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		0	G	E E11700	0.00005							

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。

₿	ڻ- ر	.⇒								Bool	:1 - Exce	el						Ē
ファイル		-6 #	恥	ページレイン	Pウト 数式	データ	校問	表示	開発	Acr	obat	♀ 実行	したい	作業を入力し	してください			
外部デ- 取り込る	-9の 新l み* エ		クエリの テーブル 最近使	表示 しから	■ 2 接線 すべて 更新 - 見リン	た パティ クの編集	2⊈ <mark>ג 2</mark> ג	7711/9-	、 クリア つ 再適用 う 詳細語	定	区切り位 二	≝ <mark>11</mark> ≝ <mark>11</mark>	₽• ~::	What-If #	分析 予測 シート	電グループイ 図目グループ作 目目小計	L ▼ 1ª 解除 ▼ 1ª	?→ YJU/(-
_		用X信	\$2发出	R.	按枕		业人	習えとノイ)	11/9-		7-	ータッール			72则	アリトラ	12 GI	2574/T
G7		*	\times	$\sqrt{-f_x}$	=SUM(D2:D52)												
	А	В		С	D	Е	F		G		H	1		J	K	L	М	N
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		Α		1000									
5		4	3	5.500107	6.250536		хс		30									
6		5	2	5.500297	12.25208													
7		6	6	5.500792	0.249208		残差二乗	和 25	5233.27									
8		7	10	5.502028	20.23175													
9		8	7	5.504988	2.235059													
10		9	6	5.511789	0.23835													
	-	~	~		0.001515													

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。

E	ۍ.							
- 7 2-	1) 木	ーム 挿入		アウト 数式 データ	校間表	示 開発 Ac	robat Q 実行したい作業を入力してください 9 共有	
月 外部 取り	〒タの新 込み▼ 」		1の表示 ブルから :使ったソース	● 接続 すべて 更新 ~ □ プロパティ	£↓ <u>【 A</u> Z ↓ 並べ替え フィル	レクー 、 クリア 、 再適用 ・ が詳細設定	ビ	
		取得と変	E換	接続	並べ替え	とフィルター	ソルバーのパラメーター ×	^
		• = ×	$\checkmark f_{\rm X}$	=SUM(D2:D52)			目的セルの設定:(工) \$G\$7 (話)	۷
	Α	В	С	D E	F	G		4
1	Х	Y	Gauss	残差二乗				
2		1	3 5.500004	6.25002	y0	5.5	変数セルの変更:(<u>B</u>)	
3		2	7 5.500012	2.249963	w	10	\$6\$2:\$6\$5	
4		3	5 5.500037	0.250037	Α	1000	割約条件の対象:(U)	
5		4	3 5.500107	6.250536	xc	30	(<u>)</u> 追加(<u>A</u>)	
6		5	2 5.500297	12.25208			麥更(C)	
7		6	6 5.500792	0.249208	残差二乗和	25233.27		
8		7 1	0 5.502028	20.23175			削除(D)	
9		8	7 5.504988	2.235059			すべて1月7ット(B)	
10		9	6 5.511789	0.23835				
11	1	0	3 5.526766	6.384547			∑ 読み込み/保存(L)	
12	1	1	5 5.558389	0.311799			✓ 制約のない変数を非負数にする(K)	
13	1	2	5 5.62238	0.387357			解決方法の選択: GRG 非線形 v オプション(P)	
14	1	3 1	0 5.746444	18.09274			\Z/	
15	1	4 1	4 5.976818	64.37146			解決方法	
16	1	5 1	9 6.38637	159.1037			/wm/mm/meansy//mm/mm/mm/mm/mm/mm/mm/mm/mm/mm/mm/mm/m	
17	1	.6 2	4 7.08309	286.1818			/Eさい。	
18	1	.7 2	7 8.216594	352.8163				
19	1	8 3	4 9.978906	577.013			ヘルプ(<u>H</u>) 解決(<u>S</u>) 閉じる(<u>O</u>)	
20	1	9 4	9 12.59492	1325.33				
21	2	0 5	1 16.29819	1204.215				-
-	÷	Sheet1	+					
入力							■ ■+ 100%	

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。	う レポート	
 ● ソルパーの解の保持 ○ 計算前の値に戻す 	解答 感度 条件	
ロンルバー パラメーターのダイアログに戻る	ロアウトライン レポート	
QK キャンセル	シナリオの保存	
ソルバーによって現在の解に収束されました。すべての	り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 開始点を変更してください。	に移動しませんでした。収束の設定値を小さくするか、	

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。





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ね。

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。

