

Origin チュートリアルガイド Part.1

最終更新 2019 年 4 月

Copyright © 2019 by OriginLab Corporation

このマニュアルのいかなる部分も、OriginLab Corporation の文書による許可無く、理由の如何に因らず、どのような形式であっても複製または送信することを禁じます。

OriginLab、Origin、LabTalk は、OriginLab Corporation の登録商標または商標です。その他、記載されている会社名、製品名は、各社の商標および登録商標です。

このマニュアルは、(株)ライトストーンの協力により、翻訳・制作したものです。

OriginLab Corporation
One Roundhouse Plaza
Northampton, MA 01060
USA
(413) 586-2013
(800) 969-7720
Fax (413) 585-0126
www.OriginLab.com

目次

1	Getting Started	1
1.1.	初めてのグラフ作成.....	1
1.2.	グラフテンプレートとバッチ作図.....	5
1.3.	データ選択.....	9
1.4.	グラフの統合と整列.....	13
1.5.	グラフの出力.....	17
1.6.	3D および等高線グラフ.....	21
1.7.	ガジェット.....	24
1.8.	カーブフィッティング.....	25
1.9.	ピーク解析.....	29
1.10.	統計.....	32
1.11.	分析テンプレート.....	37
1.12.	Origin アプリ.....	39
2	動画チュートリアル	41
3	ユーザインタフェース	43
3.1.	Origin の GUI.....	43
4	データ分析	59
4.1.	ガジェット.....	59
4.2.	カーブフィッティング.....	129
4.3.	信号処理.....	301
4.4.	ピーク解析.....	382
4.5.	データ操作.....	426
4.6.	分析テンプレート.....	481
4.7.	分析テーマ.....	492
4.8.	バッチ処理.....	496
5	統計	517
5.2.	仮説検定.....	549
5.3.	ANOVA.....	559
5.4.	ノンパラメトリック検定.....	594
5.5.	生存分析.....	605
5.6.	多変量解析.....	619
5.7.	検出力とサンプルサイズ.....	652
5.8.	ROC 曲線.....	658

1 Getting Started

Origin を初めて使用する、または過去の古いバージョンを使用している場合は、このチュートリアルの利用をお奨めします。このレッスンで紹介されているグラフ作成と解析のインターフェースなどの主要なコンセプトを理解してから、次に Origin の機能を詳細にカバーしている他の章に移動するとより理解が深まります。

各レッスンの最後にプロジェクトの保存を行います。いくつかのレッスンは前のレッスンを基にしていますので、順番にチュートリアルを進めてください。

- 初めてのグラフ作成
- グラフテンプレートとバッチ作図
- データ選択
- グラフの統合と整列
- グラフの出力
- 3D および等高線グラフ
- ガジェット
- カーブフィッティング
- ピーク解析
- 統計
- 分析テンプレート
- Origin アプリ

1.1. 初めてのグラフ作成

この最初のレッスンでは、いくつかのデータを生成してグラフを作成し、グラフでいくつかの簡単な編集を行った後に、データとグラフを Origin プロジェクトに保存します。

データの生成とグラフの作成

1. Origin を起動します。2つの列を含んだ1つのシートがある空のワークブックを確認できます。
2. 列 A を選択してから右クリックし、開いたコンテキストメニューから**列値の一律設定: 数字のセット**を選択します。




メニューの折りたたみ表示は**環境設定: オプションダイアログのその他のオプション**タブで**メニューの折りたたみの利用**のチェックを外すと無効化することができます。

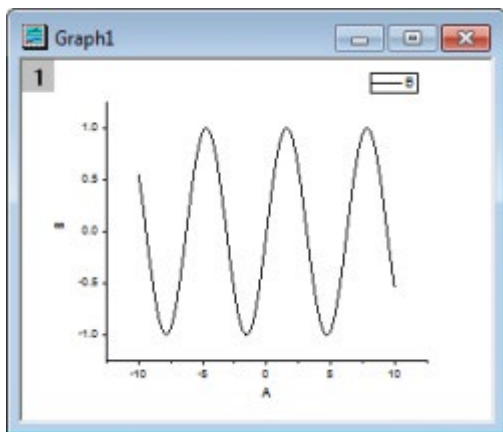
3. 標示されたダイアログボックスで**開始**に-10と入力し、**終了**に10と入力し、**増分**に0.1と入力します。**OK**をクリックしてダイアログを閉じます。列 A に指定した範囲の数字が入力されます。

4. これから列 B に列 A を関数としてセットします。列 B の **F(x)**ラベルをダブルクリックします。該当のセルが編集モードに切り替わります。次のように関数式を入力します。



sin(A)

	A(X)	B(Y)
ロングネーム		
単位		
コメント		
F(x)=		sin(col(1))


5. グラフを作成します。列 B のヘッダをクリックして列全体を選択します。インターフェースの左下にある **2D グラフ** ツールバーの折れ線ボタン  をクリックします。グラフウィンドウが開き、データが折れ線グラフとして表示されます。



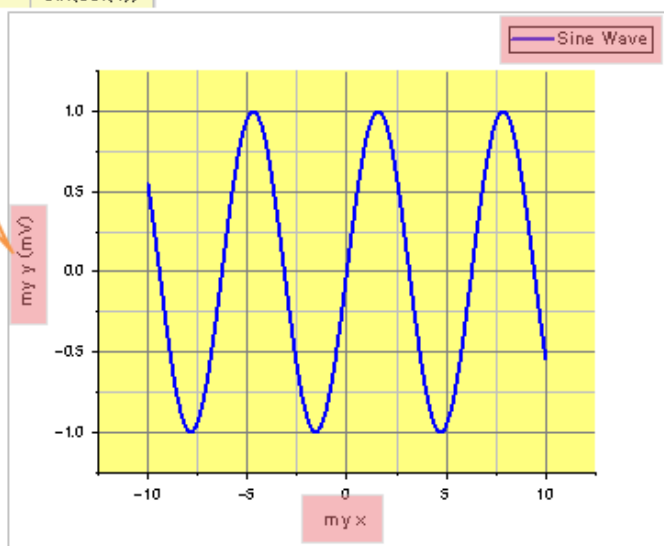
グラフを編集する

- これからグラフに対していくつかの簡単な編集を行います。X 軸を右クリックし、コンテキストメニューから **グリッド線を隠す** を選択します。これによって X 軸のグリッド線が標示されます。Y 軸も同様にします。
- 折れ線グラフをクリックして選択します。インターフェースの上部中央にある **スタイル** ツールバーで **線/境界色**  ボタンを使用して色を青に変更します。
- 線/境界の太さ** ドロップダウンリスト を使用して、線の太さを **3** に変更します。
- レイヤの内側のグラフやグリッド線が無い場所をクリックします。一度クリックしてグラフの選択を解除してから改めてレイヤを選択しなければならない場合があります。グラフレイヤが選択されると選択ハンドルが表示されます。そして、「スタイル」ツールバーの「**オブジェクトの塗り色**」ボタン  を使って、色を **薄い黄色** に変更します。
- 列 A で **ロングネーム** セルをダブルクリックして **my x** と入力します。
- 列 B で **ロングネーム** に **my y** と入力し、**単位** に **mV** と入力し、**コメント** に **Sine Wave** と入力します。



7. グラフウィンドウをクリックして選択します。グラフの X 軸と Y 軸のタイトルと凡例が適宜更新されます。今、グラフは次のようになっているはずです。


	A(X)	B(Y) 
ロングネーム	my x	my y
単位		mV
コメント		Sine Wave
F(x)=		sin(col(1))

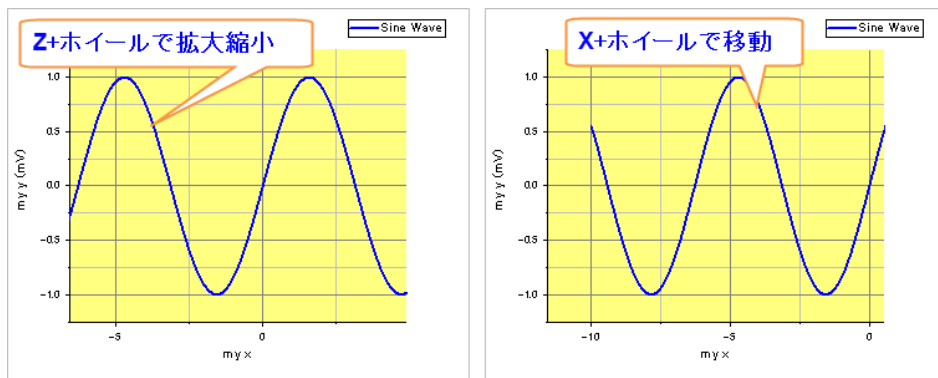
ワークシートに
セットされたメタ
データ(ロング
ネーム、単位、コ
メント)によって、
グラフは自動的に
更新されます。




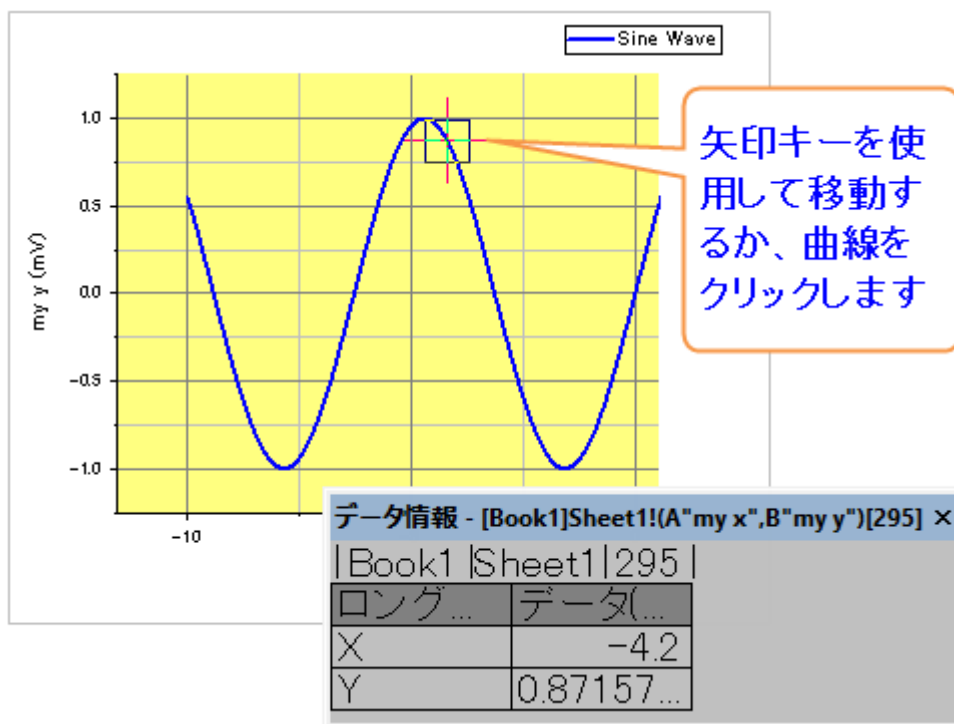
データを視覚的に探索する

- データを視覚的に探索してみましょう。グラフウィンドウのタイトルバーをクリックしてグラフウィンドウをアクティブにします。
 - Z キーを押しながらマウスホイールを使用すると X 軸を拡大縮小することができます。
 - X キーを押しながらマウスホイール使用すると X 軸を移動することができます。
 -  **Shift** キーを押しながら Z/X キーとマウスホイールを使用すると、Y 軸に対して拡大縮小と移動を行うことができます。
 - インターフェースの右側にあるグラフツールバーで再スケールボタン  をクリックすると、グラフが最大スケールに戻ります。

 グラフレイヤ内でショートカットキー**CTRL+R**を使用するとグラフを再スケールすることができます。



2. インターフェースの左側にあるツールツールバーのデータリーダ  ボタンをクリックします。
3. 曲線にカーソルを置きます。キーボードの矢印キーを使用するとグラフに沿ってカーソルを動かすことができ、その値を読み込むことができます。または、グラフの線上をクリックすることでその場所の値を読み込むこともできます。



プロジェクトを保存する

この Origin のプロジェクトは後で使用しますので保存することになります。

1. マウスのカーソルをワークスペースの左側にあるプロジェクトエクスプローラの上に移動して、展開します。
2. 上部のフォルダパネルにある **Folder1** を右クリックし、コンテキストメニューから**名前の変更**を選択します。**初めてのグラフ**と入力してフォルダの名前を変更します。
3. メニューファイル: **プロジェクトの保存**を選択してプロジェクトを保存します。プロジェクトの名前は **Getting Started Tutorials** とします。



プロジェクト、グラフテンプレート、フィット関数などのようなユーザによって作成されたファイルは、デフォルトではユーザファイルフォルダ(UFF)に保存されます。メインメニューからヘルプ:フォルダを開くを選択すると、UFF や他の Origin 関連のフォルダにアクセスすることができます。

1.2. グラフテンプレートとバッチ作図

このレッスンでは、グラフテンプレートと、バッチ作図の方法について学んでいきます。

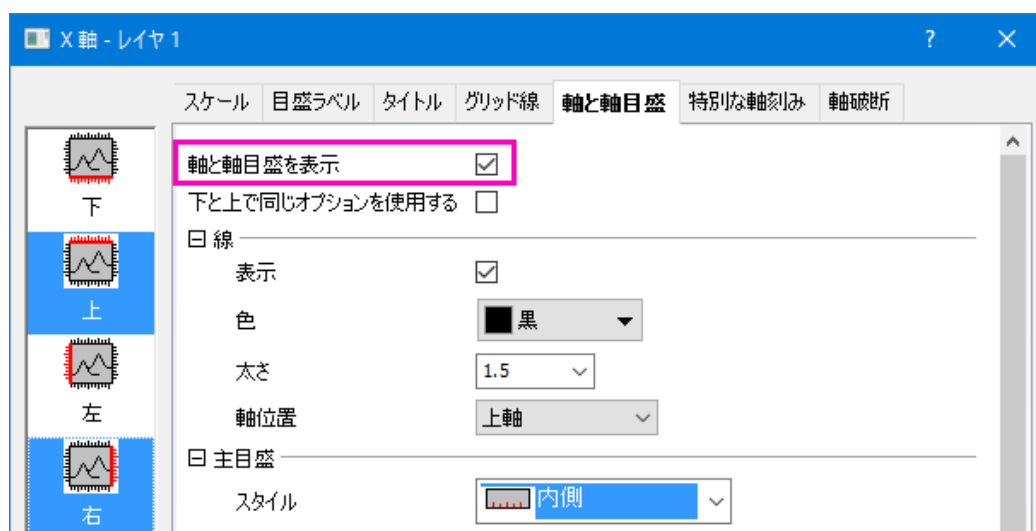
1.2.1. グラフテンプレート


レッスン 1: 初めてのグラフ作成 で保存したプロジェクトについて演習を始めましょう。グラフウィンドウを選択します。



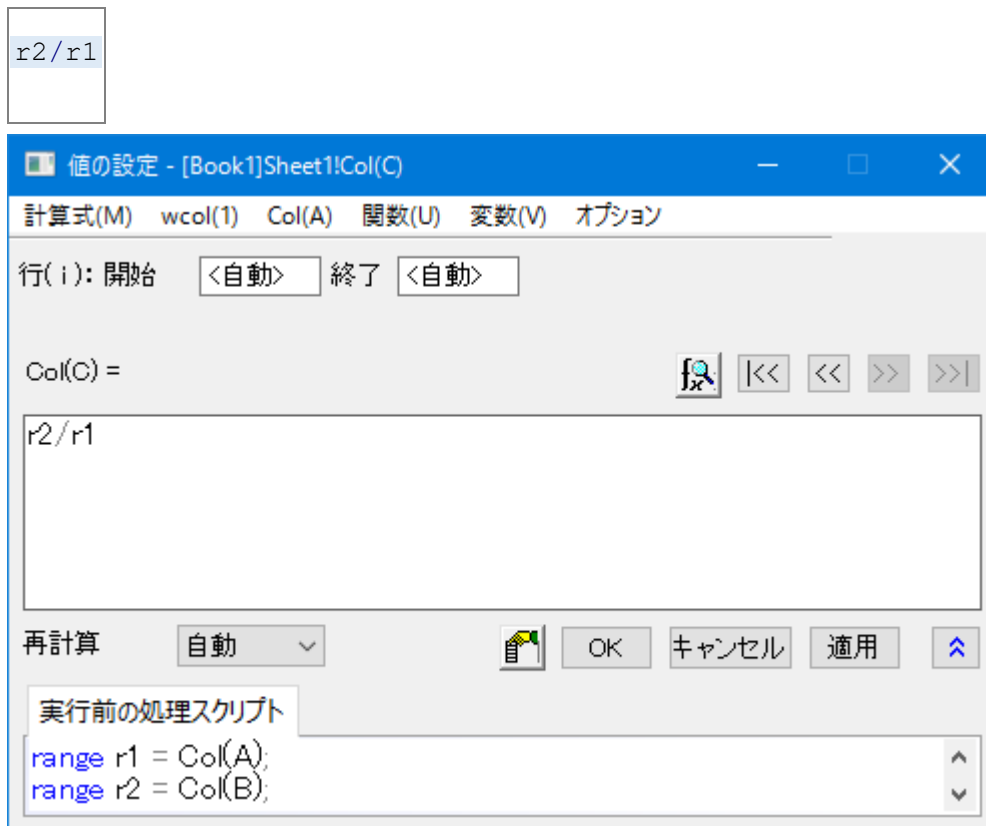
ファイル:最近使ったプロジェクト リストから、最近保存したプロジェクトをすぐに開くことができます。

1. 軸のラベルでダブルクリックして、**軸ダイアログ**ボックスを開きます。
2. キーボードの **Ctrl** キーを押しながら、左のリストボックスで、**上** と **右** のアイコンを選択します。**軸と軸目盛** タブで、**軸と軸目盛を表示** のチェックボックスにチェックを入れ、**OK** を押します。



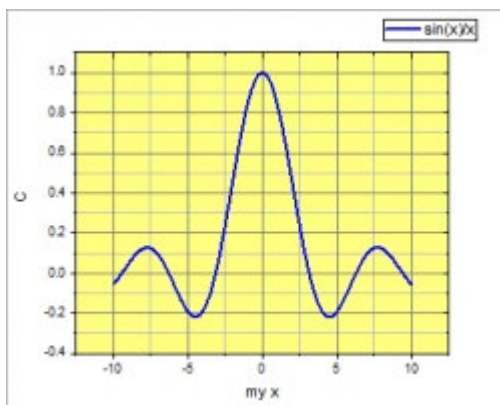
3. グラフをテンプレートとして保存しましょう。ウィンドウのタイトルバーを右クリックして、メニューから「**テンプレートの新規保存**」を選びます。
4. ダイアログが開いたら **テンプレート名** に **My Line** と入力し、**OK** をクリックしてテンプレートを保存します。
5. 新しいデータ列を作成します。ワークシートをアクティブにし、列の右側の灰色の部分で右クリックします。開いたショートカットメニューから**新しい列の追加** を選択します。
6. この列の **F(x)** セルを一度クリックし、さらに右クリックします。開いたショートカットメニューから**ダイアログを開く** を選択します。ショートカットメニューの代わりに、**Ctrl+Q** を使うことができます。
7. 開いたダイアログで、**変数: 選択から範囲変数を追加** を選択し、**ワークシートから選択する** ダイアログを開きます。ワークシートの最初の 2 列を選択し、 ボタンをクリックして選択を確定します。**入力モード** はそのまま、**OK** をクリックします。2 つの範囲変数が、ダイアログの**実行前の処理スクリプト** パネルに追加されます。

8. 上のパネルで、次のように入力します。



ダイアログメニューの **関数: サンプルのロード** で、様々な列値の設定例を参照することができます。関数メニューを開くと、沢山の関数が表示されます。この中から適切な関数を、関数編集ボックスの右上にある検索ボタンで探すことができます。

9. **OK** をクリックして、ダイアログを閉じます。C 列の **コメント** セルに、**sin(x)/x** と入力します。
10. C 列のヘッダをクリックして列全体を選択します。**作図: ユーザテンプレート** を選択し、開いたメニューから、前に作成した **My Line** テンプレートを選択します。C 列のデータで、新しいグラフが作成されます。



1.2.2. バッチ作図

このセクションでは、最初に一つのグラフを作成した後、バッチ作図を行い、さらに他のデータでグラフを複製します。

1. プロジェクトエクスプローラに移動します。上部パネルでルートレベルを右クリックして**新規フォルダ**を選択します。
2. 新しくされくされたフォルダを右クリックし、**名前の変更**を選択して名前を**バッチ作図**に変更します。空のフォルダをクリックして開きます。
3. Origin 以外の場所で**ウィンドウエクスプローラー**を開き、<Origin EXE Path>\Samples\Import and Export\ フォルダを開きます。(<Origin EXE Path> は Origin の EXE ファイルがあるフォルダです。) **Shift** キーを押しながら、次の 3 つのファイルを選択します。

- S15-125-03.dat
- S21-235-07.dat
- S32-014-04.dat

3. 選択したファイルを Origin ワークスペースにドラッグ&ドロップします。3 つのファイルがそれぞれ別の新規ワークブックにインポートされます。

The image shows three overlapping Origin workbooks, each displaying a data table with columns A(X), B(Y), and C(Y). The tables contain sample information such as 'Log Name', 'Unit', 'Comment', 'Version', 'No. of points', 'Sample', 'Measured on', 'Time', 'Run Type', 'SampleID', and 'BatchNo'. The third workbook (Book4) also includes a 'Spike Line' plot showing three distinct curves.

	A(X)	B(Y)	C(Y)
ログネーム	Time	Delta Temperature	Magnetic Field
単位	(sec)	(K)	(Oe)
コメント	S15-125-03.dat	S15-125-03.dat	S15-125-03.dat
F(x)=			
スパイクライン			

	A(X)	B(Y)	C(Y)
ログネーム	Time	Delta Temperature	Magnetic Field
単位	(sec)	(K)	(Oe)
コメント	S21-235-07.dat	S21-235-07.dat	S21-235-07.dat
F(x)=			
スパイクライン			

	A(X)	B(Y)	C(Y)
ログネーム	Time	Delta Temperature	Magnetic Field
単位	(sec)	(K)	(Oe)
コメント	S32-014-04.dat	S32-014-04.dat	S32-014-04.dat
F(x)=			
スパイクライン			
Version	3.5	3.5	3.5
No. of points	850	850	850
Sample	CO milled-squ	YBCO milled-square	BCO milled-squat
Measured on	12/03/2004	12/03/2004	12/03/2004
Time	04:20:04 AM	04:20:04 AM	04:20:04 AM
Run Type	Trial Run 3	Trial Run 3	Trial Run 3
SampleID	S32	S32	S32
BatchNo	014	014	014

Note: ドラッグ&ドロップでデータをインポートする場合、Origin を管理者で実行していないことを確認してください。

- 1つのワークブックを選択し、B列のヘッダ部分でクリックしたら、D列までドラッグし、3つの列を全て選択します。作図:複数Y軸:3Ys Y-YY を選択します。



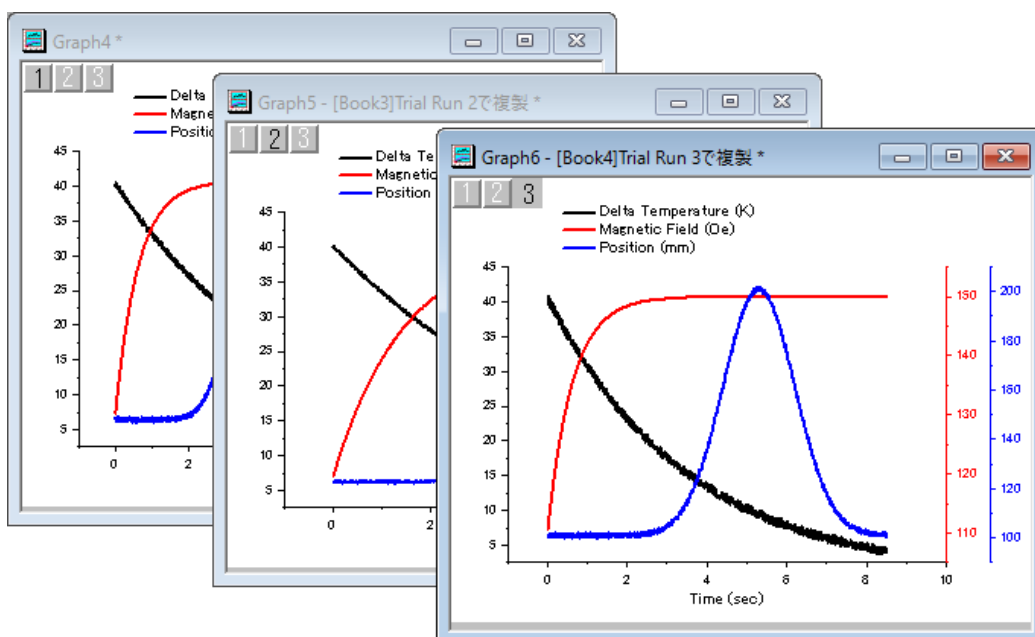
Origin は、選択した列の左側にある X 列を探索します。今回の場合、ワークシートの 1 列目を X として、選択したデータが作図されます。

- レイヤ内部をダブルクリックして、**作図の詳細ダイアログ**を開きます。左のパネルで、3つのレイヤがあることが分かります。**Layer1**の項目を開き、データを選択します。右のパネルにある**グラフの線**タブで、**太さ**を**3**に設定します。左のパネルから選択して、他の2つのプロットも線の太さを設定します。**OK**をクリックして、ダイアログを閉じます。
- では、このグラフをほかのワークブックのデータで複製します。グラフのタイトルバーで右クリックし、**複製(バッチ作図)**を選択します。開いたダイアログの「次とバッチ作図」で**ブック**を選択します。
- キーボードの **Shift** キーを押しながら、上の2つのワークブックを選択します。



現在のグラフのデータ構成に適合するプロジェクト中のワークシートを適切に見つけるため、**プロット列の一致条件**ドロップダウンを設定します。

- [OK]をクリックします。再スケールに関して確認メッセージが表示されたら、**はい**を選択します。他の2つのブックのデータから、同様の2つのグラフが作成されます。




- メニューから**ファイル:プロジェクトの保存**を選択して変更したプロジェクトを保存します。



1.3. データ選択

このレッスンではグラフのデータ選択の様々な方法について学びます。

複数ワークシートからグラフを作成

1. レッスン 2: グラフテンプレートとバッチ作図で保存したプロジェクトを開いて始めましょう。いずれかのワークブックを選択し、データ列が選択されていないことを確認してください。もし選択されている場合は、列の外の灰色の領域をクリックすることで選択を解除することができます。
2. メニューの作図 > 2D: 線図: 折れ線を選択します。作図のセットアップダイアログが開きます。
3. 右側にある  ボタンをクリックして上部パネルを開きます。既に開いている場合はボタンをクリックする必要はありません。
4. パネル左にある利用可能なデータ:ドロップダウンリストでフォルダ中のワークシートを選択します。



プロジェクト内のいずれかからワークシートを選択する場合は、ドロップダウンリストでプロジェクト中のワークシートを選択してください。

5. Shift キーを押したままシート名が Trial Run 1、Trial Run 2 と Trial Run 3 の 3 つすべてのデータを選択します。
6. 中央パネルのチェックボックスを使用して、Time を X にし、Position を Y に設定します。OK ボタンをクリックして、グラフを作成します。



このダイアログでは、3 つ目の下パネルを使用して複数レイヤのグラフでデータを異なるレイヤに適用することも可能です。もしそのパネルが開いている場合は、今回は閉じてしまってから OK ボタンをクリックしてグラフを作成してください。

利用可能なデータ:

ショートカットを含める

上中下の各パネル上で右クリックすると、場所に応じた浮動メニューが現われます。

グラフタイプ 【()は派生型を示す】

折れ線

散布図

線+シンボル

縦棒/横棒

面積

積上げ面積


色付き面積

株価(Hi-Ln-CI)

ロングネーム	シート	列	行	ファイル名	ファイル日付	作成日	逐
S15-125-03.d	Trial Run 1	4	1020	S15-125-03.dat	2015/12/10	2016/02/19 09:30:13	2
S21-235-07.d	Trial Run 2	4	720	S21-235-07.dat	2015/12/10	2016/02/19 09:30:13	2
S32-014-04.d	Trial Run 3	4	870	S32-014-04.dat	2015/12/10	2016/02/19 09:30:14	2



表示(S) [Book2]* Trial Run 1* [Book3]* Trial Run 2* [Book4]* Trial Run 3*

X	Y	yEr	L	列	ロングネーム	コメント	サンプリング間隔
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<自動>	開始/ステップ=		
<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	A	Time	S15-125-03.dat	
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	B	Delta Temperature	S15-125-03.dat	
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	C	Magnetic Field	S15-125-03.dat	
<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	D	Position	S15-125-03.dat	

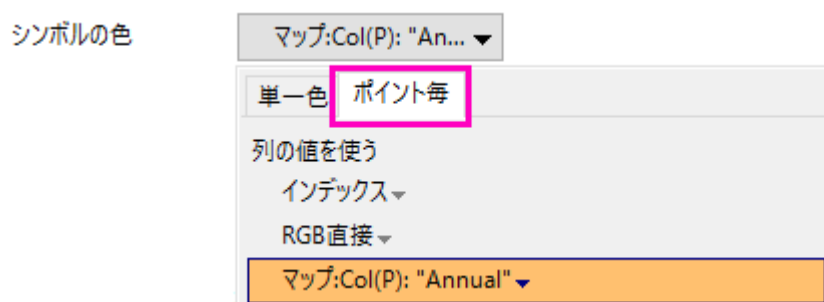
- このグラフの凡例を編集しましょう。凡例上で右クリックして**凡例: 凡例を更新**を選択します。
- 開いたダイアログで**凡例の自動更新モード**を**カスタム**に設定します。それから**凡例のカスタムフォーマット (@D, @LU etc)**編集ボックスの右側にある  ボタンをクリックし、表示されたメニューで**@WS: シート表示名**を選択します。
- 編集ボックスで文字列**@WS**の後ろにハイフン-を入力し、再び右側のボタンをクリックします。今度はワークシートで列ヘッダ行 *Sample* の内容を表示するための**@LD"Sample": Sample**を選択します。**OK** ボタンをクリックします。凡例にシート名と *Sample* 名が表示されます。


更新モード	更新	▼
凡例の自動更新モード	カスタム	▼
凡例のカスタムフォーマット(@D,@LU etc)	@WS-@LD"Sample"	▼ >
非表示プロットの凡例を隠す	<input checked="" type="checkbox"/>	
フィット曲線の凡例を隠す	<input type="checkbox"/>	

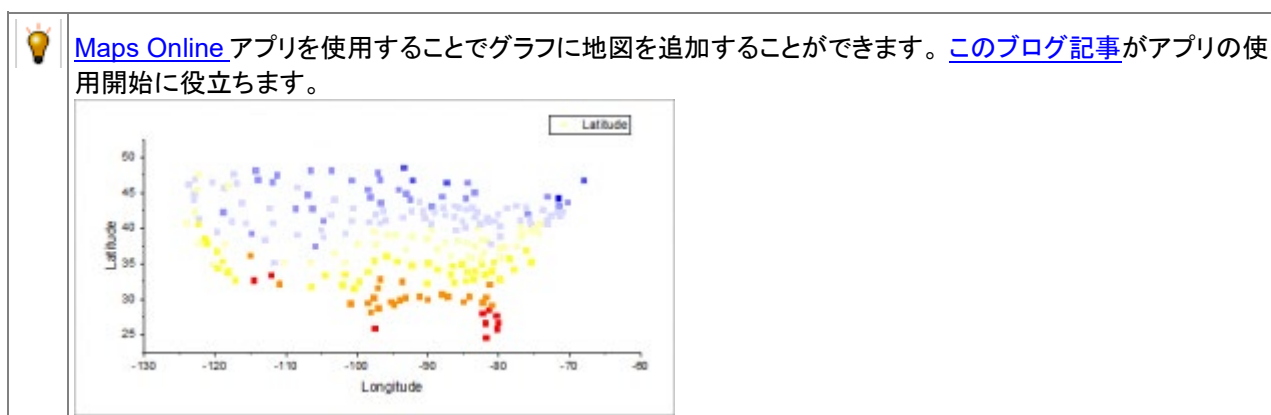
他の列を使用してグラフの色を設定する

- プロジェクトエクスプローラに移動します。上部パネルでルートレベルを右クリックして**新規フォルダ**を選択します。
- 新しく作成されたフォルダを右クリックし、**名前の変更**を選択して名前を**データ選択**に変更します。空のフォルダをクリックして開きます。
- 単一 ASCII のインポート**ボタン  をクリックして、<Origin EXE Path>\Samples\Graphing フォルダ内の *US Mean Temperature.dat* ファイルを選択してインポートします。
- 米国の主要都市の位置(列 *Longitude* と *Latitude*)の散布図と、1年の平均気温(列 *Annual*)のカラーマップデータポイントを作図しようと思います。名前が **January** の列のヘッダをクリックし、そのままドラッグして名前が **December** の列までをすべて選択します。それから右クリックして**列を隠す/隠さない: 隠す**を選択します。
- Longitude* 列を選択してから右クリックして**列 XY 属性の設定: X 列**を選択します。
- 列 *Latitude* を選択し、左下部のツールバーで**散布図**ボタン  をクリックして X 軸 *longitude*、Y 軸 *latitude* のグラフを作成します。
- いずれかのデータポイントをダブルクリックして**作図の詳細 - プロット属性**ダイアログを開きます。
- 左パネルの *Layer1* の下にあるデータプロットのノード [*US Mean Temperature.dat*]...を選択し、右パネルで**シンボル**タブをアクティブにします。**シンボルの色**ドロップダウンリストをクリックして表示されたメニューで**ポイント毎**タブを選択します。

9. カラーマップドロップダウンリストをクリックし、カラーマップ: Col(P): "Annual"を選択します。適用をクリックしてダイアログを開いたまま効果を確認します。





10. グラフで軸の長さを、XとYの値の範囲に応じたスケールに設定しましょう。左側パネルで *Layer1* ノードをクリックします。右側のレイヤの大きさ/描画スピードタブに移動します。軸の長さをリンクする X:Y の比率 チェックボックスにチェックを入れ、box 比率は 1 のままにします。OK をクリックしてダイアログを閉じ、効果を確認します。
11. デフォルトではカラーマップは *Rainbow* に設定されています。グラフのいずれかのデータポイントをクリックし、スタイルツールバーのパレットツールバーボタン  をクリックします。今回のデータに適している *Temperature* パレットを選択します。グラフのいずれかの場所をクリックしてプロットの選択を解除します。



12. メニューからファイル:プロジェクトの保存を選択して変更したプロジェクトを保存します。

グラフ用に複数の隣接していない列を選択する

- 標準ツールバーの新規ワークブックボタン  をクリックして、新しいワークブックを開きます。
- 標準ツールバーの Excel インポートボタン  をクリックします。開いたファイルダイアログで <Origin EXE Path>\Samples\Import and Export フォルダ内の *United States Energy (1980-2013).xls* ファイルを選択します。オプションダイアログを表示するチェックボックスにチェックが付いている事を確認して OK をクリックします。

- 開いたインポートオプションダイアログでインポートオプション > ヘッダ行 ノードを開きます。サブヘッダの行数で<自動>を選択し、ロングネームに対する行のインデックスドロップダウンリストで 3 を選択し、単位に対する行のインデックスドロップダウンリストで 4 を選択します。コメント行の開始インデックスで 1 を選択し、コメント行の終了インデックスで 2 を選択します。
- ヘッダをすべてのシートに適用にチェックを入れて、これらの設定を Excel ファイルのすべてのシートで使用するようになります。

日 列ヘッダ

メインヘッダの行数	0
サブヘッダの行数	<自動>
ショートネームに対する行のインデックス	<なし>
ロングネームに対する行のインデックス	3
単位に対する行のインデックス	4
コメント行の開始インデックス	1
コメント行の終了インデックス	2
パラメータの行の開始インデックス	<なし>
パラメータの行の終了インデックス	<なし>
ユーザパラメータの開始インデックス	<なし>
ユーザパラメータの終了インデックス	<なし>
列のXY属性	<変更なし>
ヘッダを全てのシートに適用	<input checked="" type="checkbox"/>

- OK をクリックして、ファイルをインポートします。名前が Oil の最初のシートに移動します。Ctrl キーを押しながら Crude Oil Production、Oil Consumption と Total Oil Production 列を選択します。

	A(X1)	B(X2)	C(Y2)	D(Y2)	E(Y2)	F(Y2)	G(Y2)
ロングネーム	Year	Crude Oil Prod	Estimated Petr	Oil Consumption	Refinery Capa	Total Oil Production	Proved Reserv
単位		1K Barrels/Day	1K Barrels/Day	1K Barrels/Day	1K Barrels/Day	1K Barrels/Day	1B Barrels
コメント	Source: U.S. Energy Information Administration						
F(x)=							
スパークライン							
1	2013	7441.4904	-6618.3613	18961.1285		12342.7671	30.529
2	2012	6496.6967	-7371.5197	18490.2136	17736.37	11118.6939	26.544
3	2011	5644.7918	-8753.6067	18882.0725	17736.37	10128.4657	23.267
4	2010	5481.8712	-9484.537	19180.126	17583.79	9695.589	20.682
5	2009	5349.8329	-9641.315	18771.4	17671.55	9130.0849	19.121
6	2008	5000.0628	-10934.0379	19497.9641	17593.847	8563.9262	21.317
7	2007	5076.9808	-12210.9752	20680.378	17443.492	8469.4027	20.972
8	2006	5087.8685	-12371.0947	20687.418	17338.814	8316.3233	21.757
9	2005	5181.5178	-12477.219	20802.1615	17124.87	8324.9425	21.371

- メニューの作図 > 2D: 複数パネル: 積み上げグラフを選択し、開いたダイアログでデフォルトの設定のまま OK をクリックして積み上げグラフを作成します。


プロジェクトファイルを保存します。



1.4. グラフの統合と整列


このレッスンでは、グラフの統合で、いくつかのグラフを作成し、統合したり、レイヤを整列したりします。クリーンテンプレートとしてグラフを保存し、同様のデータから素早くグラフを作成することも出来ます。

データのインポートとグラフの作成

1. レッスン3: データ選択 で保存したプロジェクトファイルを開きます。プロジェクト・エクスプローラー で、新規にルートフォルダを作成し、**統合したグラフ**と名前を変えます。空のフォルダをクリックして開きます。
2. 「標準」ツールバーの「**新規ワークシート**」ボタン をクリックします。
3. 空のワークブックをアクティブにし、標準 ツールバーにある、**単数 ASCII のインポート**ボタン  をクリックします。開いたダイアログで、<Origin EXE Path>\Samples\Statistics フォルダを開き、*automobile.dat* を選択します。開くボタンをクリックして、ファイルをインポートします。

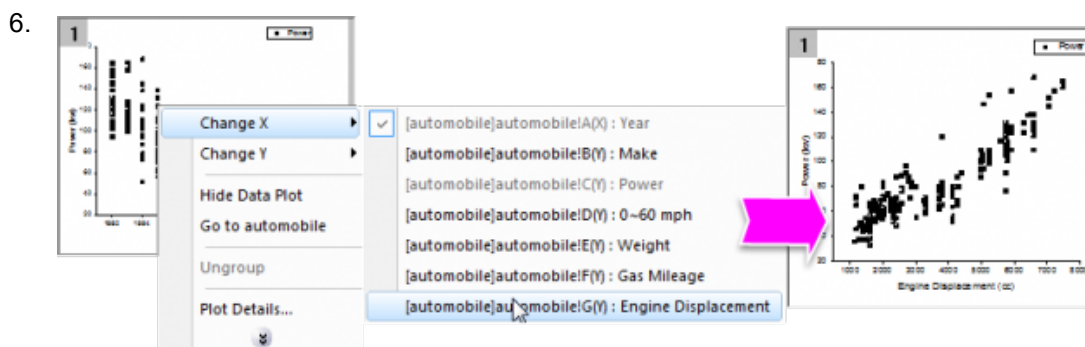


ファイルダイアログの**オプションダイアログを開く**のチェックを外して、ASCII オプションダイアログが開かないようにします。初期設定では、新規のブックに次回ファイルをインポートするようになります。


4. C 列のヘッダをクリックして列全体を選択します。2D グラフ ツールバーにある、**散布図** ボタン  をクリックして散布図を作成します。
5. 散布図をクリックして選択し、プロット上で右クリックします。コンテキストメニューが開きますので、**X を変更**: **[automobile]automobile!G(Y):EngineDisplacement** を選択して X データを変更します。再スケールするかどうか確認するメッセージが開きますので、**はい** を選択し、**OK** を押します。



メッセージには複数の選択肢があります。もし、**はい**、これからも同様に行い、再度尋ねることは必要ありません。を選択した場合、このダイアログは現れなくなります。ヘルプ: **確認メッセージの復活** から、全ての確認メッセージを復活させることが出来ます。



7. 凡例を選択し、キーボードの **Delete** キーを押すと削除出来ます。
8. このグラフのコピーを作成して、コピーのデータを変更します。まず、ワークシートに戻り、タイトルバーの右上にある **X** ボタンを押します。開いたダイアログで **非表示化** を選びます。画面からこのウィンドウが非表示となります。

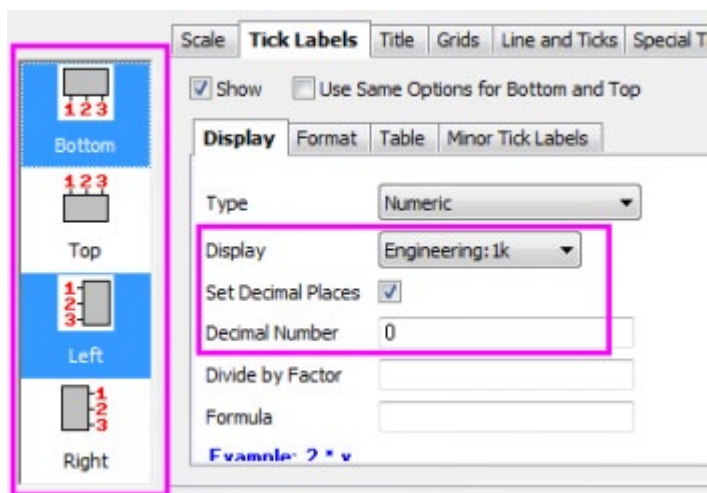
 非表示となったウィンドウは、プロジェクト・エクスプローラーの下パネルに、霞んだアイコンで表示されています。ウィンドウを再度開きたい場合は、アイコンをダブルクリックします。

9. グラフウィンドウのタイトルバーで右クリックし、**ウィンドウの複製作成** を選択し、コピーを作成します。これを後 2 回行い、合計 4 つのグラフウィンドウを表示します。
10. **ウィンドウ:上下に並べる** をクリックすると、4 つのグラフが重なることなく、画面に並べられます。
11. 先に説明した **X を変更** または **Y を変更** では、次のようにコピーしたグラフの X/Y 設定を変更し、必要に応じて再スケールを行います。
 - コピー1: Y を `[automobile]automobile!D(Y):0^60 mph` に変更
 - コピー2: X を `[automobile]automobile!E(Y):Weight` に変更
 - コピー3: X を `[automobile]automobile!F(Y):Gas Mileage` に変更
12. Power と Weight の組み合わせのグラフをアクティブにします。同じ設定を行いましょ。データプロットをダブルクリックして、**作図の詳細** ダイアログボックスを開きます。次のように、作図プロパティを変更します。
 - シンボル形状を丸に変更し、**シンボルの色** をオリーブに変更します。
 - **透過率** を 55% に設定します。

OK ボタンをクリックし、ダイアログを閉じます。

13. Y 軸をダブルクリックして、**軸ダイアログ** を開きます。次のように、軸のプロパティを変更します。
 - **目盛ラベル** タブをアクティブにします。キーボードの **Ctrl** キーを押しながら、左のパネルで **下** と **左** の両方の軸を選択します。
 - **表示** サブタブで、表示を **工学:1k** に設定します。

- **小数点以下の桁数の設定** にチェックを入れ、**桁数** を 0 と入力します。**OK** ボタンをクリックし、ダイアログを閉じます。



14. このグラフの設定形式を他の 3 つのグラフにコピーすることが出来ます。軸の外側のようなグラフの空白の部分で右クリックし、コンテキストメニューから**フォーマットのコピー: 全てのスタイルフォーマット**を選択します。
15. メインメニューから**編集: フォーマットの貼り付け(詳細)**を選択します。**フォーマットを適用する**ダイアログが開きます。下にある**適用スコープ**のドロップダウンで**フォルダ中の全グラフ**を選択します。**適用**ボタンをクリックし、他のグラフにフォーマットを貼り付けます。**閉じる**をクリックします。

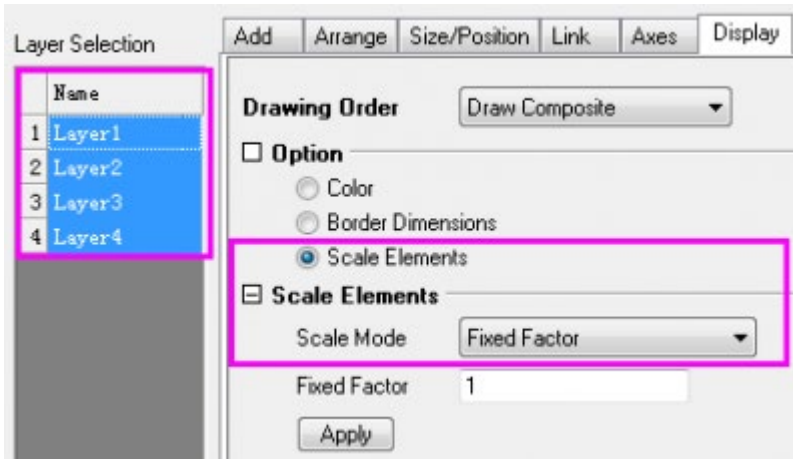
グラフの統合と整列

1. これら 4 つのグラフを統合します。メインメニューから、**グラフ操作: グラフウィンドウの統合**を選択します。
2. **グラフウィンドウの統合**ダイアログが開きます。初期設定のまま、**OK**ボタンをクリックし、4つのレイヤを持つグラフウィンドウが新規に開きます。
3. 統合したグラフにある 4 つのレイヤを並べ替えることが出来ます。**グラフ操作: レイヤ管理**をメインメニューから開きます。**レイヤ管理**ダイアログが開きます。
4. **配置**タブを開き、**間隔 (ページ寸法の%)**欄を開きます。次のように設定します。
 - 水平ギャップ = 15
 - 垂直ギャップ = 15
 - 左余白 = 10
 - 右余白 = 5
 - 上余白 = 5
 - 下余白 = 15**適用**ボタンをクリックします。
5. **表示**タブを開きます。キーボードの **Ctrl** キーを押しながら、左の**レイヤ**にある 4 つのレイヤを選択します。**オプション**欄にある**スケールエレメント**にチェックを入れます。**スケールモード**を**固定倍率**にし、**固定倍率**に1と入力します。

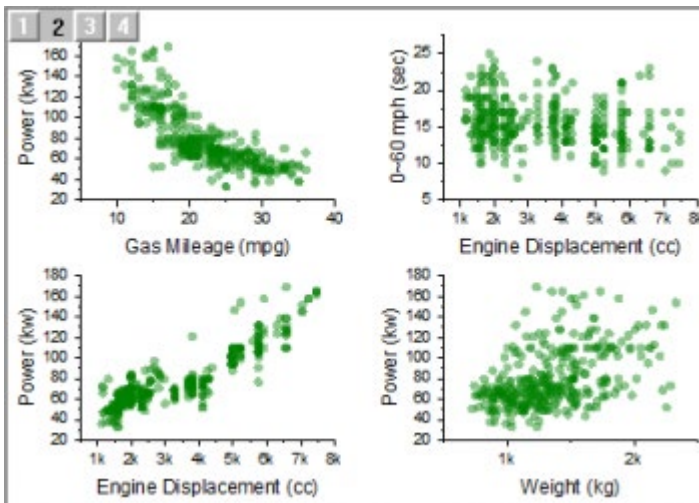


グラフィックをドラッグしたりして大きさが変わったり、統合したときにレイヤの大きさが変わったりすると、テキストフォントや他のグラフオブジェクトは再スケールされます。レイヤレベルの作図の詳細ダイアログで、表示タブをクリックし、スケールエレメントグループを設定することで、この状況を制御することが出来ます。

6. 適用ボタンをクリックします。OK をクリックしてダイアログを閉じます。

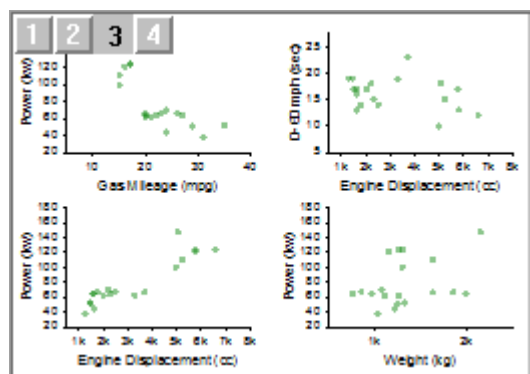


最終的に、下図のようなグラフになります。




7. プロジェクトエクスプローラーの下パネルにあるアイコンをダブルクリックして、Automobile ワークブックをアクティブにします。B 列を選択し、右クリックして **フィルタ:フィルタの追加と削除** を選択してフィルタを追加します。
8. 列ヘッダの左上にフィルタアイコンが追加されますので、クリックします。コンテキストメニューが現れるので、**全て選択** を一度選択して全てのアイテムを非選択にし、次に、**Honda** にチェックを入れて OK をクリックし、**Honda** に関連

した行だけを表示します。他の行は全て非表示となり、全てのグラフでも変更が更新されます。



クローンテンプレートとスマートプロット

- では、統合したグラフをテンプレートとして保存しましょう。タイトルバーを右クリックして、**テンプレートの新規保存** を選択します。**テンプレートの保存** ダイアログが開きます。
- クローンテンプレートのマーク** にチェックが入っていることを確認したら、**プロット列の一致条件** を **ロングネーム** に設定します。テンプレート名に、*MyMergeGraph* と入力して、**OK** をクリックします。テンプレートが保存されたというメッセージがメッセージログに残されます。

 他のグラフの状態に合わせて、クローンテンプレートに列の場所、列の名称が保存されます。同様の列位置や名称の他のデータから、複雑な構造のグラフを複製することが出来ます。

- Automobile* ワークブックアクティブにします。B 列のフィルタを選択し、*Honda* と *Lexus* の両方を選択して **OK** をクリックし、両方のメーカーを表示します。
- ワークブックをアクティブにして、メインメニューから**作図: ユーザーテンプレート: MyMergeGraph** を選択します。先に統合して作成したグラフと同様の設定、形式で新しいグラフが作成されます。

プロジェクトファイルを保存します。



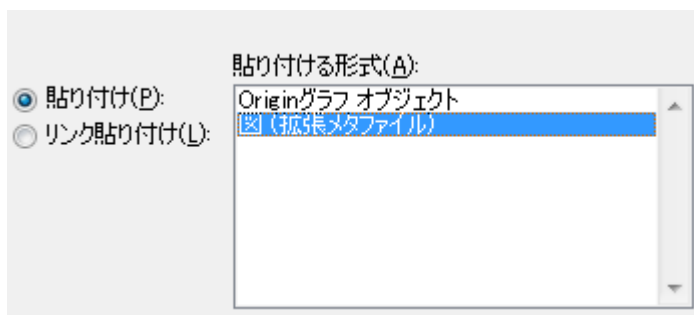
1.5. グラフの出力

このレッスンでは、グラフの出力に利用できる様々なオプションを学習します。

他のアプリケーションへのグラフ貼り付け


- レッスン4: グラフの統合と編集 で保存したプロジェクトを開きます。最後に作成したグラフウィンドウをクリックして選択します。

2. メインメニューの **編集: ページコピー** またはショートカット **CTRL+J** で グラフページをコピーします。
3. Microsoft® Word を開き、**Ctrl+V** を押します。ワードにグラフが埋め込みオブジェクトとして貼り付けられます。
4. Word のグラフをダブルクリックします。Origin が新規に開きます。ここでは、グラフとグラフに関連するデータだけが、プロジェクトの中で利用出来ます。
5. **フォーマット: 作図の詳細(ページ属性)** から、ページレベルの **作図の詳細** ダイアログを開きます。右のパネルにて、背景の色を **表示** タブから選択して変更します。色を **明るい灰色** に設定します。OK をクリックします。
6. メインメニューの **ファイル: 終了して(文書1)に戻る** を選択します。Origin は閉じられ、文書中のグラフィイメージは更新されます。
7. グラフページをコピーするには、手順 1~2 を繰り返します。その後、Word 文書に戻り、グラフの選択を解除して **Enter** キーを押して文書内の新しい行に移動します。**ホーム** タブ下で、**貼り付けアイコン** をクリックします。ドロップダウンリストから **形式を選択して貼り付け** を選択します。
8. 開いたダイアログで、**図(拡張メタファイル)** を選択して OK を押します。Origin のグラフが画像として貼り付けられます。画像を右クリックすると、**図の書式設定** ダイアログが開きます。

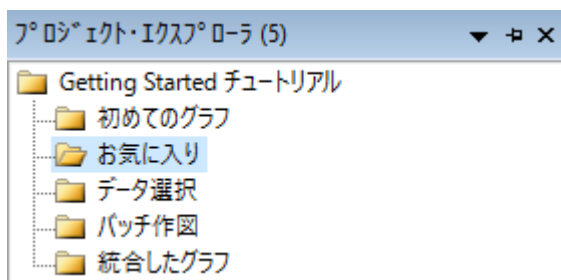


Word や PowerPoint のようなアプリケーションに埋め込みオブジェクトとして Origin のグラフが貼り付けられた場合は、グラフを構成する全てのデータも Word 文書に保存されます。これにより、グラフをダブルクリックすると、新規に Origin が立ち上がり、編集が出来るようになります。しかし、文書中にオブジェクトとして、沢山のグラフがあり、それらのグラフを構成するデータが大きい場合、文書の容量も大きくなります。

グラフをパワーポイントに送る

1. Origin のグラフウィンドウをアクティブにして、**グラフをパワーポイントに送る** ボタン  を押します。
2. 開いたダイアログの設定はデフォルトのままにして、**OK** をクリックします。PowerPoint ファイルの新しいスライドとして、グラフが貼り付けられます。

3. グラフのタイトルバーで右クリックし、ショートカットをお気に入りに追加 を選択します。プロジェクト・エクスプローラーのお気に入り フォルダに、このグラフが追加されます。



4. プロジェクト・エクスプローラー にある、最初のグラフ フォルダを選択します。グラフウィンドウを選択し、タイトルバーで右クリックします。ショートカットをお気に入りに追加 フォルダ要望に応じて、プロジェクト内の他のグラフウィンドウからショートカットを追加します。
5. プロジェクト・エクスプローラー に移動し、お気に入り フォルダをアクティブにします。下のパネルで、何も選択せず白色の部分で右クリックし、メニューから、表示モード:より大きいアイコンを使用 を選択します。これにより、より大きいアイコンでグラフが表示されます。



お気に入り フォルダのアイコンをダブルクリックし、閲覧や編集のためにグラフを開きます。グラフのアイコンまたは具ラウフウィンドウのタイトルバーで右クリックし、開いたコンテキストメニューから元のフォルダに戻るを選択します。

6. プロジェクト・エクスプローラー の上部パネルにあるお気に入り フォルダの上で右クリックし、グラフをパワーポイントに送る を選択します。ダイアログが開きますので、そのままの設定で進みます。フォルダにある全てのグラフがパワーポイントに送られます。Note: この操作はお気に入りフォルダだけでなく、他の全てのフォルダで行うことが出来ます。



ダイアログには、プロジェクトにある全てのグラフを、名前でグラフを特定して、パワーポイントに送るオプションがあります。操作に先だって準備したパワーポイントファイルにある特定のスライドの複製に、グラフを配置することが出来ます。

スライドショー

1. プロジェクト・エクスプローラー の上部パネルにあるお気に入り フォルダの上で右クリックし、グラフのスライドショーを選択します。
2. ダイアログが開きますので、そのままの設定で進みます。スライドショーがスタートします。次のグラフ、前のグラフを見るには、矢印キーを使います。

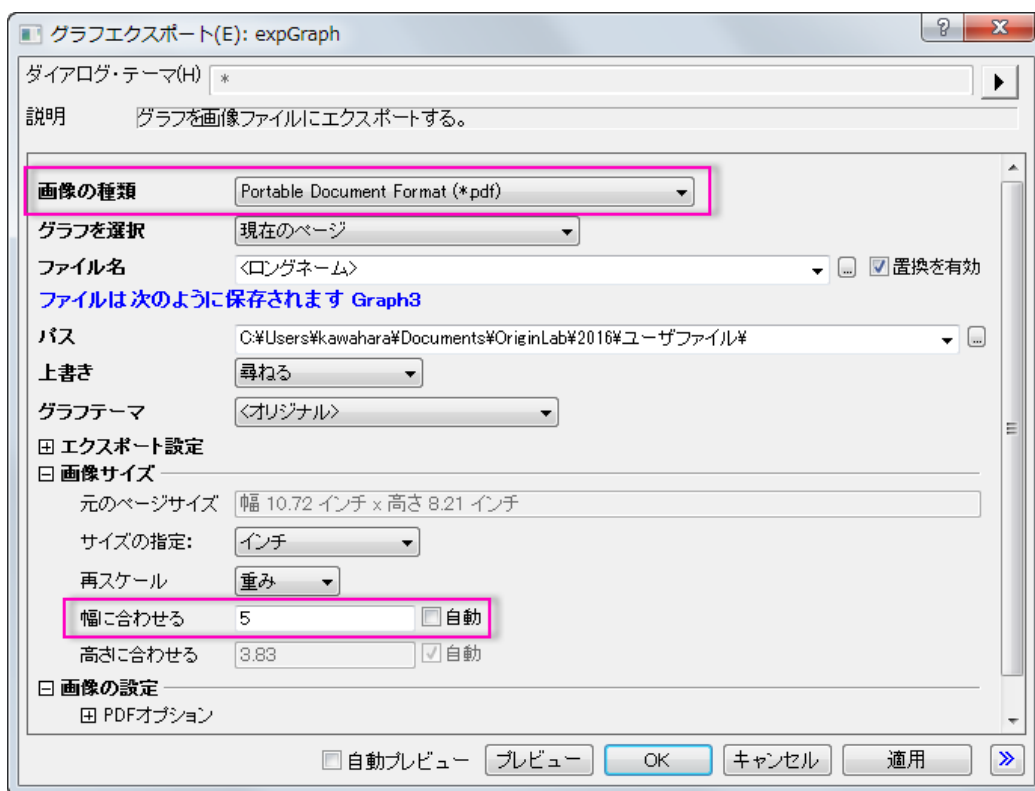


プロジェクト・エクスプローラーの下のパネルの何も無いところで右クリックし、表示モードの 詳細 を選択します。下のパネルのタイトルバーを右クリックして、スライドにチェックを入れます。列の順番はドラッグで変更することが出来ます。追加された スライド 列を使ってグラフの順番を変更します。スライド列のヘッダ部分で一

度クリックすると、グラフの順番をドラッグで設定することが出来ます。この順番は、スライドショーやパワーポイントへのグラフの出力、外部への画像出力の操作の際に適用されます。

グラフエクスポート

1. プロジェクト・エクスプローラーに戻り、下のパネルから**統合グラフ** を選択します。
2. **ファイル:グラフのエクスポート** を選択し、次のダイアログボックスの設定を変更します。
 - **画像の種類** のドロップダウンメニューから、**Portable Document Format (*.pdf)** を選択します。
 - **グラフを選択** のドロップダウンリストから、**現フォルダ中の全て** を選択します。
 - **画像サイズ** の欄を開き、**幅に合わせる** のテキストボックスに、**5** と入力します。



3. **OK** ボタンをクリックして、ダイアログを閉じます。
4. 画面左隅の**メッセージログ** タブをクリックします。エクスポートされたパスが表示されます。初期設定では、このパスはユーザファイルフォルダに設定されています。パスをコピーし、**ウィンドウズ エクスプローラー** に貼り付けて所定のフォルダを開きます。Origin から出力された PDF ファイルを見つけることが出来ます。

プロジェクトファイルを保存します。




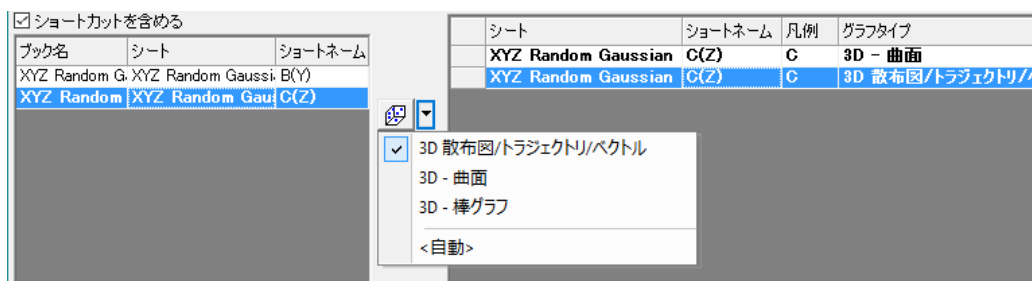
1.6. 3D および等高線グラフ

このレッスンでは 3D グラフ、等高線グラフ、プロファイルグラフの作成方法を学びます。それらのグラフのデータは、ワークシートの XYZ 列、または行列ウィンドウのセルの配列として構成されている必要があります。

3D 曲面


1. 前回のレッスンで保存したプロジェクトを開き、**3D および等高線グラフ**という名前のフォルダを追加します。クリックして空のフォルダを開きます。
2. 「標準」ツールバーの「**新規ワークシート**」ボタン をクリックします。
3. <Origin EXE Path>\Samples\Matrix Conversion and Gridding\XYZ Random Gaussian.dat をインポートします。
4. 列 C のヘッダを右クリックし、コンテキストメニューから**列 XY 属性の設定: Z 列** を選びます。
5. 列 C を選択したままにします。メニューから**作図: 3D 曲面: カラーマップ曲面**と選択して、曲面図を作成します。
6. グラフページの左上にある **1** と表示されているレイヤアイコンをダブルクリックして、**レイヤの内容**ダイアログボックスを開きます。
7. 左のパネルで、**C(Z)**を選択します。中段のセクションで、**A** ボタンの隣にあるドロップ & ダウン矢印をクリックします。

ドロップダウンリストから **3D 散布図/トラジェクトリ/ベクトル**を選択します。**プロットの追加ボタン**  をクリックして、右側のパネルにグラフを追加します。



8. **OK** をクリックしてダイアログを閉じます。曲面上にそれぞれのデータポイントがあるグラフが表示されます。
9. キーボードの **R** キーを押したまま、マウスを使用すれば自由に回転させることができます。




イメージプロファイル

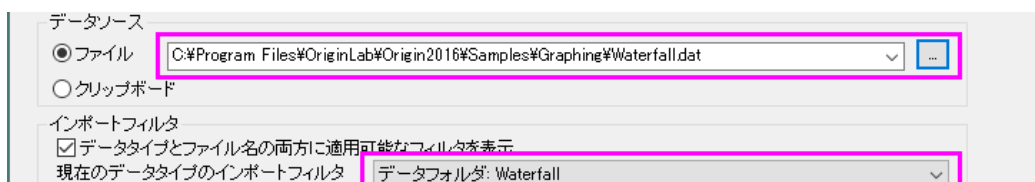
1. **標準**ツールバーの**新しい行列ウィンドウ**ボタン  をクリックし、新しい行列ウィンドウを作成します。
2. メニューから**データ: インポート: イメージファイルを行列へインポート**を選択し、<Origin EXE Path>\Samples\Image Processing and Analysis フォルダ内の *cell.jpg* を選択して、イメージを行列にインポートします。
3. 行列をアクティブにし、メニューから**作図: 等高線: イメージプロファイル**を選択します。イメージプロファイルグラフが作成され、**イメージ等高線プロファイル**ダイアログが表示されます。
4. このダイアログで **HLine** タブを選択し、**幅**ランチャを開いて**ピクセルを 50**に変更して水平線を広げます。



ダイアログのボタンを使用して、複数の水平線、垂直線、任意の線を追加することができます。グラフィックは適切なレイヤでプロファイルの曲線を表示します。プロファイルグラフは行列かワークシートのデータから作成することもできます。

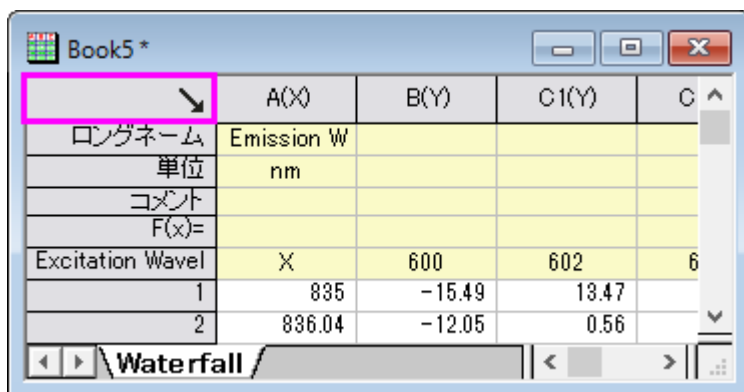
仮想行列から等高線図と曲面図を作成する


1. 新規ワークブックボタン  をクリックし、新しいワークブックを作成します。
2. インポートウィザードボタン  をクリックします。開いたダイアログで、ファイルの右側にある...ボタン  をクリックし、<Origin EXE Path>\Samples\Graphing フォルダ内の waterfall.dat を選択します。完了ボタンをクリックして、ファイルをインポートします。



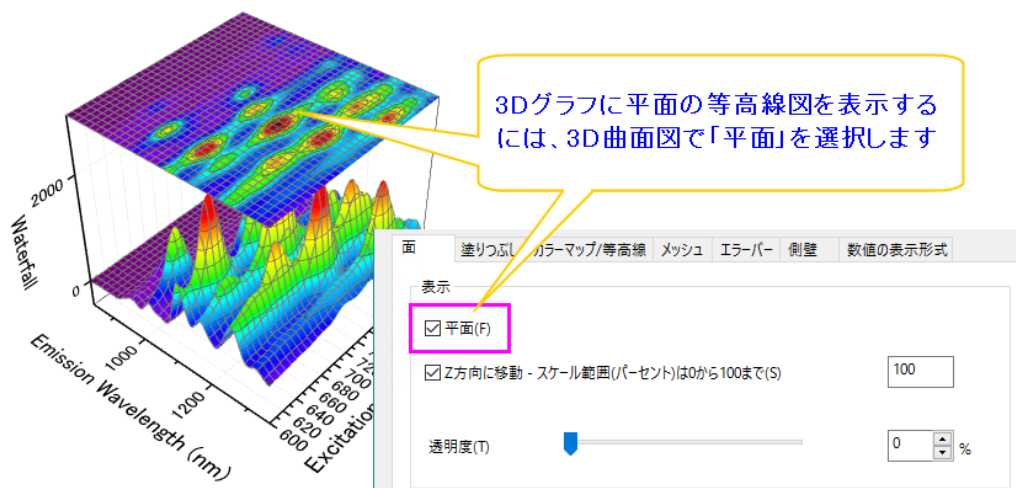
インポートウィザードはヘッダ行から変数を抽出するために ASCII ファイルを分解することもできます。すでに選択したファイルは完了ボタンをクリックしたときに適用されている事前定義フィルタを持っています。

3. マウスでカーソルをワークブック左上角に移動し、カーソルの形状が下図のようになったら、クリックしてワークブックのすべての列を選択します。



4. メインメニューの作図> 等高線図: カラーマップ等高線 を選択します。表示された plotvm ダイアログで、行列ブックの代わりにワークシートにあるデータで、仮想行列用にデータ構成を指定する必要があります。
5. Y 値を列ラベルに変更し、列ラベルを Excitation Wavelength(nm)に設定します。
6. OK ボタンをクリックして設定を適用し、等高線図を作成します。
7. 右側にあるツールバーでスピードモードを有効化/無効化ボタン  を一度クリックして、グラフのスピードモードの設定を無効化します。
8. Waterfall データのワークブックに戻ります。ワークシートのすべての列を選択したままの状態、メニューから作図: 3D: 投影図付きの 3D カラーマップ曲面を選択します。


9. **plotvm** ダイアログが開きます。ダイアログの上部の**ダイアログ・テーマ**に<シート>とセットされていることに注意してください。これは最後に使用された設定がワークシートに保存されたことを示しています。**OK** をクリックして同じ設定を適用します。投影図付きの 3D カラーマップ曲面が作成されます。
10. 等高線図をダブルクリックして、**作図の詳細ダイアログ**を開きます。**面**タブで**平面**チェックボックスにチェックが入っていて、Z 方向に移動(オフセット)が 100%になっていることに注意してください。この設定は立方体の上面に平面の等高線図としてデータプロットを表示します。**OK** をクリックして作図の詳細ダイアログを閉じます。



異なる行列や仮想行列からのデータでも、それぞれに適切なオフセットの値を設定して平面図を離すことで、同じ 3D グラフのレイヤと一緒に作図することができます。これによって同じグラフで関連するデータを一緒に分析することができます。

11. **Z 軸** をダブルクリックして、**軸**ダイアログボックスを開きます。**スケール**タブを開き**終了**の値を 4000 にして、**OK** をクリックします。これにより、3D 曲面の表示が改善します。投影等高線図は立方体の上面に残ったままです。

3D 関数グラフ

1. メニューの**ファイル:新規作成:関数グラフ:3D 関数グラフ**を選択します。
2. ダイアログボックス上部の**テーマ**の横にある三角記号のボタン  をクリックします。コンテキストメニューから **Mexican Hat(System)** を選択してサンプルの設定を読み込みます。
3. **OK** をクリックして、グラフを作成します。



パラメトリック関数は既存のグラフに追加することができ、実データのグラフのように統合することができます。[3D Function Gallery](#) ページでサンプルをダウンロードすることができます。


プロジェクトファイルを保存します。

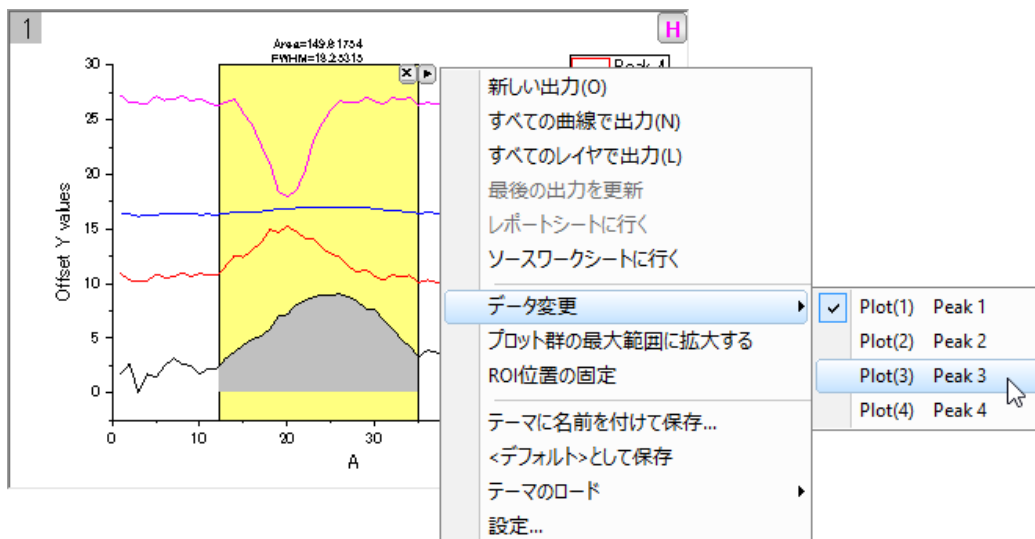


1.7. ガジェット

このレッスンでは、ガジェットを使用してグラフでデータの探索分析を実行します。

積分ガジェット

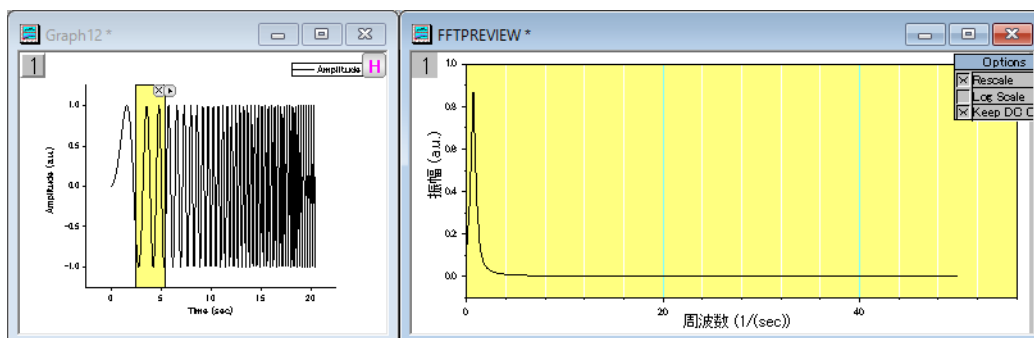
1. 前回のレッスンで保存したプロジェクトを開き、プロジェクトエクスプローラのルートレベルに**ガジェット**という名前の新しいフォルダを追加します。
2. 新しいワークブックを作成し、標準 ツールバーの**単一 ASCII のインポート**ボタン  をクリックして <Origin EXE Path>\Samples\Curve Fitting\Multiple Gaussians.dat ファイルをインポートします。
3. データセットのロングネームを追加しましょう。列 B の**ロングネームラベル**行に"Peak 1"と入力します。そのロングネームのセルをクリックして選択します。セルの右下角にマウスを移動すると、カーソルが"+"に変わります。マウスを左クリックしながら、列 C から列 E へドラッグします。自動的にロングネームに *Peak 2*、*Peak 3*、*Peak 4* と入力されます。
4. 列 B から E までの列ヘッダ上でクリックしてドラッグし、列を選択します。メインメニューから**作図: 複数 Y 軸: Y オフセット付積上げ折れ線**を選択します。
5. グラフをアクティブにしてメインメニューから**ガジェット: 積分...**を選択します。
6. デフォルト設定のまま、**OK** ボタンをクリックします。グラフ内に**関心領域 (Region of Interest、ROI)**が配置されます。希望のデータ範囲をカバーするように**関心領域 (ROI)**を移動したりサイズを変更したりします。
7. **関心領域 (ROI)**の右上にある三角ボタンをクリックして**設定**を選択し、ダイアログを再度開きます。
8. **出力タブ**を開き、**出力先**の項目にある、**ワークシートに追加**にチェックを付けます。**OK** をクリックして、ダイアログを閉じます。
9. レイヤに複数のグラフがあるときに、このガジェットはデフォルトではアクティブなデータに対して動作します。今回の場合は、アクティブなグラフは *Peak 1* です。例えば *Peak 3* にデータを変更したいときは、**関心領域 (ROI)**の右上にある三角ボタンをクリックして、コンテキストメニューから**データ変更: Plot(3): Peak 3**を選択します。



10. 再び三角ボタンをクリックして**すべての曲線で出力**を選択します。すべての曲線に対する積分結果のワークブックが作成されます。三角ボタンをクリックしレポートシートに行くを選択すると出力ワークブックに切り替わります。
11. グラフの関心領域(ROI)の右上にある **X** ボタンをクリックしてガジェットを削除します。

FFT ROI ツール

1. 新しいワークブックを作成し、<Origin EXE Path>\Samples\Signal Processing\Chirp Signal.dat をインポートします。
2. 列 B を選択してメインメニューから**作図: 折れ線: 折れ線**を選択して、折れ線グラフを作成します。
3. グラフをアクティブにしてメインメニューから**ガジェット: FFT ROI ツール...**を選択します。ダイアログが開いたら、デフォルトのまま **OK** ボタンをクリックします。関心領域(ROI)がグラフに配置され、FFT の結果を表示する FFTPREVIEW という名前の他のグラフが作成されます。
4. FFTPREVIEW グラフの左上にある **Log Scale** のチェックを外します。それから元データの折れ線グラフのウィンドウと FFTPREVIEW のグラフウィンドウを横に並べます。データ曲線の最初の狭い範囲をカバーするように関心領域(ROI)を移動してサイズを変更します。
5. 関心領域(ROI)を選択してからキーボードの矢印キーで関心領域(ROI)を右側に移動すると、もう 1 つのグラフで FFT の結果が更新されることが確認できます。



プロジェクトファイルを保存します。







1.8. カーブフィッティング

このレッスンでは線形と非線形の回帰の方法を学びます。

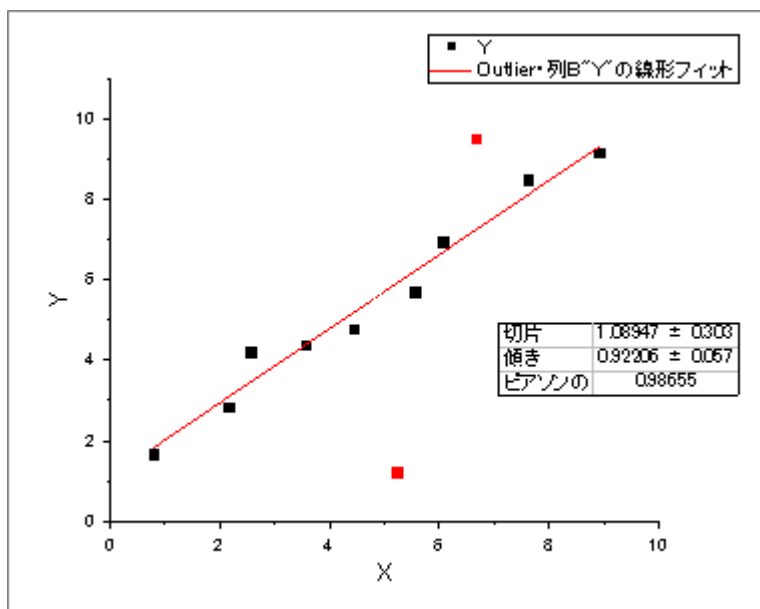
外れ値付き線形フィット

1. 前回のレッスンで保存したプロジェクトを開き、プロジェクトエクスプローラのルートレベルに**カーブフィッティング**という名前の新しいフォルダを追加します。

- <Origin EXE Path>\Samples\Curve Fitting\Outliers.dat ファイルをインポートします。
- 2 つ目の列を選択し、散布図を作成します。
- メニューの**解析: フィット: 線形フィット**を選択します。開いたダイアログでデフォルトの設定のまま **OK** をクリックして、線形フィットを実行します。
- グラフでフィット結果テーブルを右クリックし、**表中の値**を選択します。**切片**、**傾き**、**ピアソンの r**を除いてすべての入力を削除します (CTRL キーを押しながら複数選択します)。**OK** をクリックし、必要に応じて結果レーぶるの大きさを変更します。
- 左側のツールバーにある**現プロットを対象にマスクを付加するボタン**  をクリックし、他のポイントと明らかに離れている右下のポイントをマスクします。
- グラフページの左上にある**錠前アイコン**  がデータが変更されたこと示す黄色に変わりますが、フィット結果を更新する必要があります。
- ESC キーを押してカーソルをポインタモードに戻します。黄色の錠前アイコンをクリックし、表示されたメニューから**再計算モード: 自動**を選択します。フィット結果が更新されます。


 標準ツールバーにある**再計算ボタン**  をクリックすると、プロジェクト内のすべての未決定状態の操作を更新することができます。

- グラフに戻りマスクツールを使用して上部にある外れ値をマスクします。結果が自動的に更新されることが分かります。グラフはこの画像に近い状態になります:



非線形曲線フィット


- 新しいワークブックを開き、<Origin EXE Path>\Samples\Curve Fitting\Gaussian.dat ファイルをインポートします。

2. ロングネームが *Amplitude* の列を選択し、散布図を作成します。
3. ワークブックに戻り、ロングネームが *Error* の列を選択してから右クリックし、コンテキストメニューから **列 XY 属性の設定: Y エラーバー** を選択します。
4. マウスイカーソルを選択している列の右端に近づけます。マウスイカーソルの形状が  に変わります。この状態で列をグラフにドラッグアンドドロップします。データがエラーバーとして散布図に追加されます。
5. このデータをフィットしましょう。メニューから **解析: フィット: 非線形曲線フィット** を選択して **NLFit** ダイアログを開きます。
6. **関数選択** ページで、**カテゴリ** ドロップダウンで **Peak Functions** を選択し、**関数** ドロップダウンで **Gauss** を選択します。
7. **フィット** ボタンをクリックしてフィットを実行し、次のダイアログで **いいえ** を選択してグラフウィンドウをアクティブなままにしておきます。
8. 次に y_0 を 0 に修正し結果を更新しようと思います。グラフの左上の角にある緑の錠前アイコンをクリックして、**パラメータを変更** を選択します。
9. 先ほどのダイアログが最後に実行した設定の状態です。再度開きます。パラメータタブに移動し、 y_0 の **固定** ボックスにチェックを入れ、**値** に 0 と入力します。

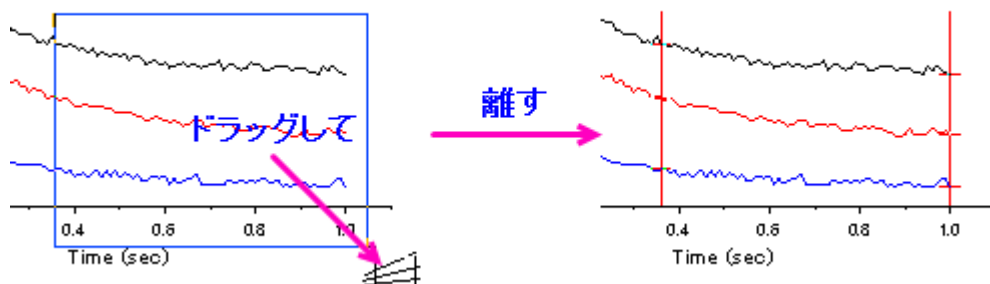
ピーク番号	パラメータ	意味	固定	値
1	y_0	offset	<input checked="" type="checkbox"/>	0
1	xc	center	<input type="checkbox"/>	26

10. **フィット** ボタンをクリックしてファイルを更新し、ダイアログを閉じます。グラフの更新されたテーブルで $y_0 = 0 \pm 0$ となっていることを確認できます。

パラメータを共有したグローバルフィット


1. 新しいワークブックを開き、`<Origin EXE Path>\Samples\Curve Fitting\Exponential Decay.dat` ファイルをインポートします。
2. 3つのY列を選択し、折れ線グラフを作成します。
3. すべてのデータプロットを同時に0.4から1.0のx範囲でフィットしようと思います。インターフェースの左側にドッキングされているツールツールバーで、click the down arrow button on the right of **アクティブプロットから選択** ボタン  の右側にある下向き三角のボタンをクリックします。表示されたメニューから **全てのプロットから選択** を選択します。グ


ラフに移動し、0.4 から 1.0 の x 範囲をカバーして、3 つの曲線がすべて含まれるようにドラッグして四角を描きます。



4. **CTRL+Y** キーを押すと、素早く **NLFit** ダイアログが開きます。カテゴリに **Exponential** をセットし、関数に **ExpDec1** をセットします。
5. 設定タブの下にある**データ選択**をクリックし、**入力データ**ノードを開いて3つの曲線が追加されていることを確認します。**Range#**ノードを開いてデータの範囲を行インデックスまたは x 値のどちらかで修正することができます。



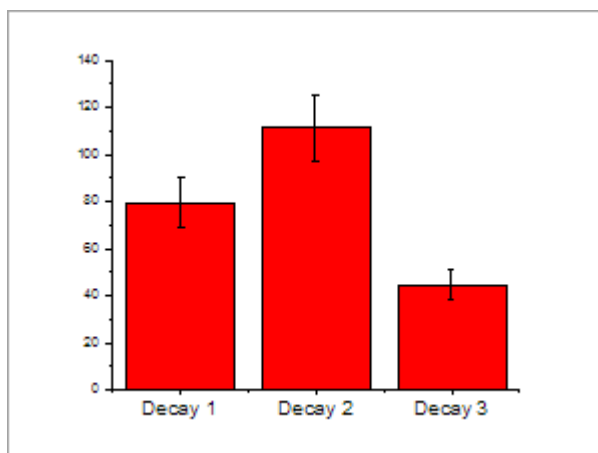
範囲選択が複数のプロットで行われていない場合は、Origin は複数のプロットを含んでいるグラフィケヤからアクティブなデータプロットを選択します。この場合、**入力データ**の右側にある  ボタンをクリックして**現在のページのすべてのプロットを追加する**を選択することができます。

6. **複数データフィットモード**を**グローバルフィット**に変更し、**パラメータ**タブに切り替えて**収束までフィット**ボタン  をクリックして、3 つすべての曲線を同時にダイアログを開いたままフィットします。
7. グローバルフィット中にパラメータを共有することができます。time constant **t1** の**共有**ボックスにチェックを入れます。他の曲線の時間パラメータがパラメータリストから削除されたことに気が付くはずですが。
8. **フィット**ボタンをクリックし、次のダイアログでは**はい**を選択してレポートシートに切り替えます。このダイアログが表示されない場合はグラフの緑色の錠前アイコンをクリックして**結果に行く**を選択します。
9. レポートをした方向にスクロールして**概要**テーブルを表示します。すべての time constants **t1** が同じ値で共有されていることが分かります。

概要		y0		A1		t1		k	tau
		値	標準誤差	値	標準誤差	値	標準誤差	値	値
Decay 1		97.76426	1.04512	75.32799	11.78854	0.28532	0.03567	3.5049	0.19777
Decay 2		50.44112	1.39417	107.39208	16.22812	0.28532	0.03567	3.5049	0.19777
Decay 3		14.46759	0.73292	43.06541	7.60772	0.28532	0.03567	3.5049	0.19777

10. **概要**ノードの横にある下向き三角のボタンをクリックし、**新しいシートとしてコピー**を作成を選択します。フィット結果を含んだ新しいシートがブックに追加されます。

11. 列 D と E を選択し、縦棒グラフを作成して振幅パラメータ(A1)が 3 つのデータセット全体でどのように変化するかを表示します。

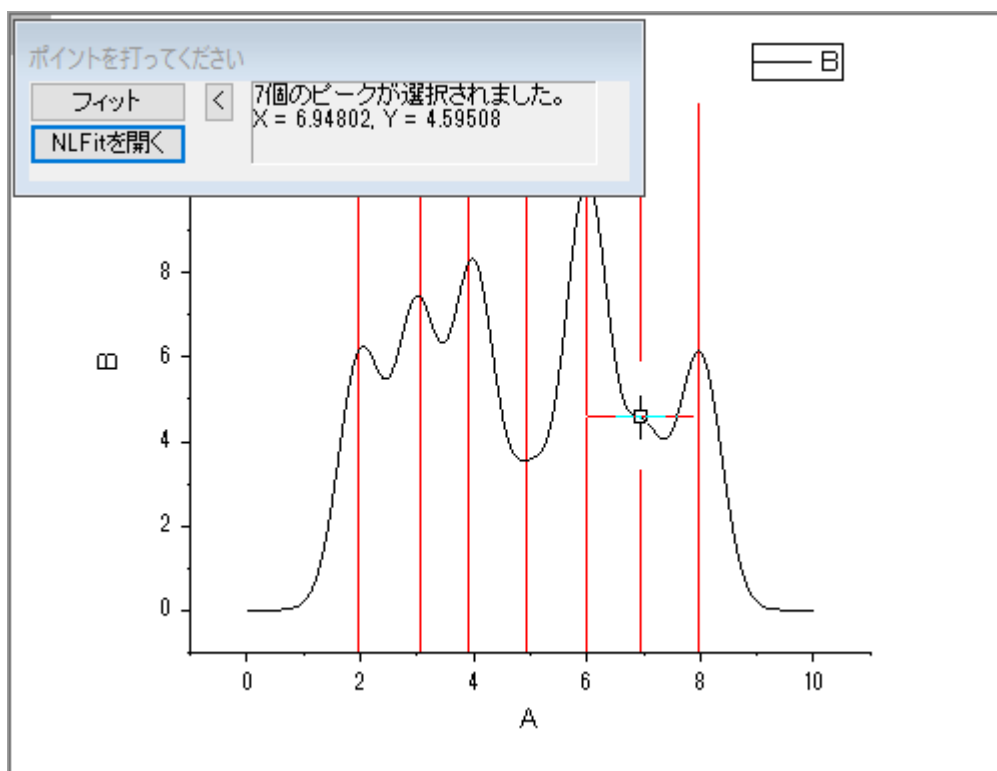


1.9. ピーク解析

このレッスンでは、重なったピークの畳み込みと基線の修正を含んだフィッティングを実行します。

畳み込みのある複数のピークフィット

1. 前回のレッスンで保存したプロジェクトファイルを引き続き使用します。プロジェクトエクスプローラに新規でフォルダを作成し、**ピーク解析**という名前に変更します。
2. 新しいワークブックを開き、<Origin EXE Path>\Samples\Spectroscopy\HiddenPeaks.dat ファイルを開きます。
3. 列 B を選択して折れ線グラフを作成します。
4. グラフウィンドウをアクティブにし、**解析:ピークと基線:複数ピークフィット** をクリックします。**複数ピークフィット** のダイアログが開きます。**ピーク関数** のドロップダウンリストから *Gauss* を選択して **OK** をクリックします。
5. **ポイントを打ってください** ダイアログがグラフの中に開きます。このダイアログはウィンドウの中で移動することができます。ピークの中心をダブルクリックし、ピークを選択します。次の画像のように、2 つの隠れたピークを含む全 7 つのピークを選択します。

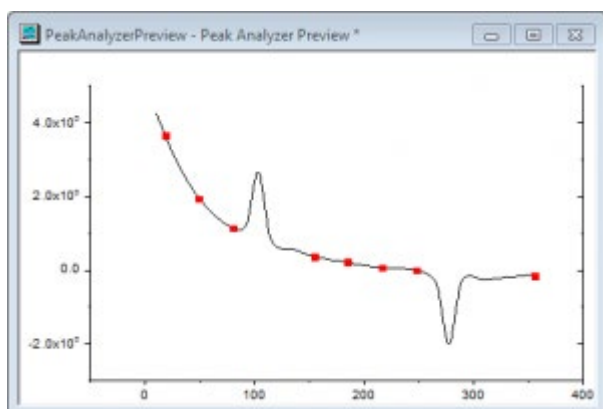


ポイントを打ってください ダイアログにある、**NLFitを開く** ボタンをクリックすると、選択したピークに対応したピーク中心に初期値が与えられた NLFit ダイアログが開きます。このダイアログで、ご要望に合わせたフィット制御を行うことができます。

6. 7つのピークを選択し終わったら、**フィット** ボタンをクリックします。フィット結果がワークブックに追加されます。

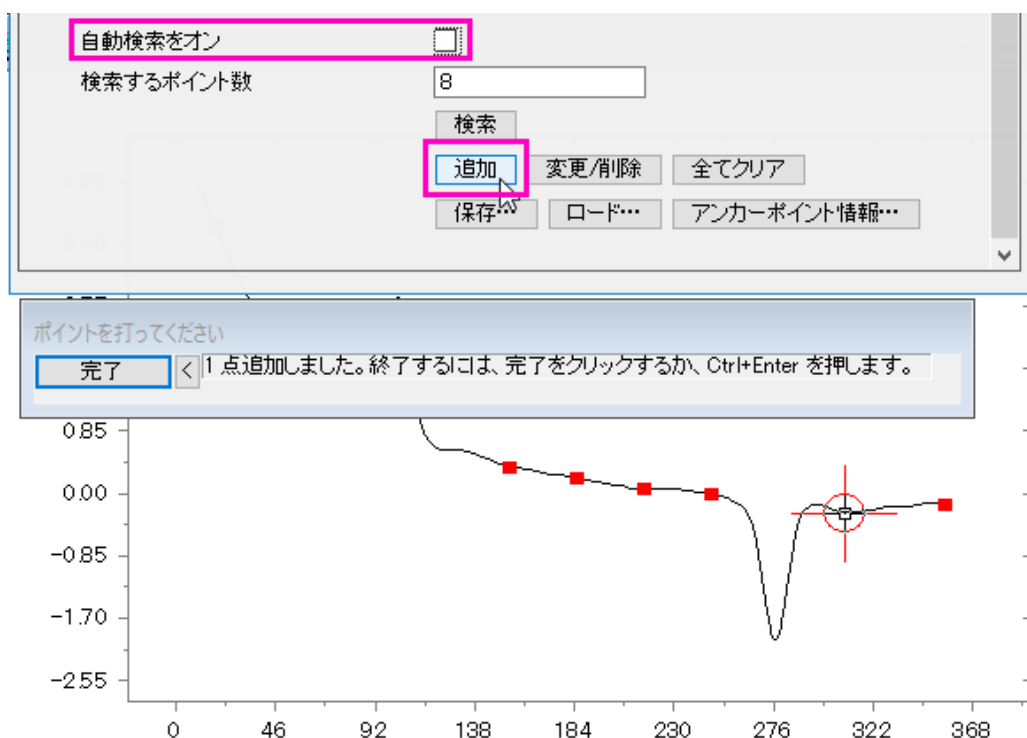
基線でピークをフィット

1. このレッスンは OriginPro 版が必要です。新しいワークブックを開き、<Origin EXE Path>\Samples\Spectroscopy\Peaks_on_Exponential_Baseline.dat. ファイルをインポートします。
2. B 列を選択し、**解析:ピークと基線:ピークアナライザー** をクリックします。ピークアナライザー ダイアログと、選択したデータ列のグラフプレビューが、ウィンドウに表示されます。
3. ダイアログ下のパネルで、**処理** 欄にある**ピークフィット(Pro)** を選択します。上のパネルが更新され、ピークフィットを含んだ工程図が表示されます。
4. **進む** をクリックします。「**基線モード**」ページで、「**基線モード**」ドロップダウンリストから「**ユーザー定義**」を選びます。「**進む**」をクリックし、「**基線の作成**」ページに移動します。赤色の線で繋がれた 8 つのアンカーポイントがプロット上に追加されたことがプレビュー画面で分かります。現在の設定では、この基線が作成されています。



戻る ボタンをクリックして**基線モード** のページに移動し、基線モードの設定を調整します。

5. **検索するポイント数** の下にある、**検索** ボタンをクリックし、スペクトル上のアンカーポイントを検索します。8つのアンカーポイントが追加されました。
6. **自動検索をオン** のチェックを外し、**追加** ボタンをクリックして、スペクトル上にアンカーポイントを追加していきます。次の画像のように、スペクトル上でダブルクリックして、アンカーポイントを追加していきます。



7. アンカーポイントを選択して、削除することも出来ます。**完了** をクリックして、**ピークアナライザ**に戻ります。
8. **スペクトルにスナップする** にチェックを入れて、選択したアンカーポイントが近接のスペクトル上のポイントに移動するようにします。**進む** をクリックします。

9. **基線の作成** ページで、**接続線** に **フィット(Pro)** を選択します。**フィット関数** の欄で、**関数** に **ExpDec2** を選択します。**進む** をクリックし、**ピーク検索** ページに移動します。
10. **検索** ボタンをクリックします。プレビューで、2つのピークが見つかりました。



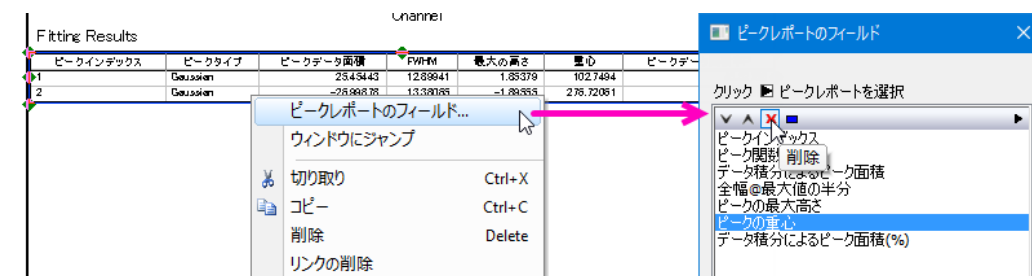
重なったピークを検出するために、2次微分を含んだ幾つかのピーク検索方法が選択できます。2次微分の曲線も確認することが出来、ノイズの多いデータのピーク検索に対応するためにスムージングを行うことが出来ます。

11. **進む** をクリックし、**ピークのフィット** ページに移動します。初期設定のまま、**完了** をクリックして、ピークフィットを終了します。フィット結果を含んだグラフが作成されます。



フィット制御 ボタンをクリックすると、パラメーターの固定や共有、境界や制約の指定などのフィットの制御が行えます。

12. では、**フィット結果** のテーブルを編集して、表示する必要のない、いくつかのピークプロパティを非表示にしてみましょう。結果テーブルを右クリックし、コンテキストメニューから**ピークレポートのフィールド**を選択します。テーブルに含まれるすべてのプロパティを含む**ピークレポートのフィールド** ダイアログが開きます。このダイアログで、プロパティを削除したり、順番を変えたりすることが出来ます。**ピークの重心** を選択して、**削除** ボタンをクリックして非表示にします。**データ積分によるピーク面積(%)** も同様に非表示にします。**OK** を押して、グラフのデータテーブルを更新します。



プロジェクトファイルを保存します。



1.10. 統計

Originには、多数の統計分析ツールがあります。OriginPro版では上級向けの統計ツールが利用出来ますが、このレッスンでは、Origin標準版で利用できるツールで学習していきます。

記述統計

1. 前回のレッスンで保存したプロジェクトを開き、**統計**という名前のフォルダを新規に作成します。
2. 次のファイルをインポートします。<Origin EXE Path>\Samples\Statistcs\body.dat.

3. **D(Height)**にある最初の5行をドラッグしながら選択します。選択したデータの基本的な統計(平均、合計、度数)が画面右下のステータスバーに表示されます。






ステータスバーの統計値が表示されている上で右クリックすると、ここにどの内容を表示するかを設定できます。

The screenshot shows a data table with columns A(Y) through E(Y). The data is as follows:

	A(Y)	B(Y)	C(Y)	D(Y)	E(Y)
ロングネーム	name	age	gender	height	weight
単位					
コメント					
F(x)=					
スパークライン					
1	Kate	12	F	146	42.2
2	Lose	12	F	150	56.4
3	Jane	12	F	136	33.2
4	Sophia	12	F	163	65
5	Grace	12	F	128	28.7
6	Tom	12	M	148	38
7	James	12	M	150	58
8	Sun	12	M	126	35.9
9	Barb	13	F	148	50.6
10	Alice	13	F	150	47.9

The status bar at the bottom shows: 平均=144.6 総和=723 数=5 最大=163. The 'ステータスバーカスタマイズ' dialog is open on the right, showing options for '製品アップデート', '自動アップデート', 'テーマ', 'アクティブな範囲', 'アクティブなページ', '角度単位', '平均', '総和', '数', '最小', '最大', 'SD', and '中央値'.

4. 「統計:記述統計:列の統計」を選択します。ダイアログが開きますので、**入力** タブを選択し、**範囲 1**の項目を開きます。データ範囲の右にある「ワークシートから選択する」ボタン  をクリックします。ワークシートに画面が切り替わりますので、マウスドラッグで **D** と **E** を選択します。再度ボタンをクリックしてダイアログボックスを開きます。
5. **Group** では、三角形のボタン  をクリックして、**B(Y): age** 列を選択します。再度ボタンをクリックし、**C(Y): gender** を選択します。リストで、**Group** ボックスの中の "...gender" を選択し、**上に移動** ボタン  を使うと、一番上に移動します。
6. **OK** をクリックして、レポートを作成します。

The screenshot shows a report titled '列の統計 (2016/02/17 17:39:27)'. The report displays a table of descriptive statistics for the 'height' column, grouped by gender (F and M). The table is as follows:


	N	合計	平均	標準偏差	合計	最小	中央値	最大
F	12	5	144.6	13.40895	723	128	146	163
	13	3	145.33333	6.4291	436	138	148	150
	14	5	154.2	3.70135	771	150	153	160
	15	2	155.5	3.53553	311	153	155.5	158
	16	2	154	8.48528	308	148	154	160
	17	1	153	--	153	153	153	153
	18	3	141.33333	13.31666	424	126	148	150
M	13	4	151	7.87401	604	143	150.5	160
	14	7	161	5.68624	1127	155	158	170
	15	5	160.8	4.71169	804	153	163	165
	16	1	168	--	168	168	168	168
	17	2	170.5	3.53553	341	168	170.5	173
	18	5	144.0	15.173	294.5	98.7	122.9	65
	19	5	144.0	15.173	294.5	98.7	122.9	65

7. レポートシートの **Descriptive Statistics** ノードの右にある下向き三角形ボタンをクリックし、メニューから**桁数指定法**を選択します。
8. 開いたダイアログで、**桁数指定法**を**少数桁数=**に設定し、**桁数**を**1**に指定します。**OK**をクリックし、レポートの全ての数値テーブルにある表示形式を更新します。



全てのレポートシートの数値表示は、メインメニューの**ツールのオプション**から、**オプション**ダイアログを開き、**数値の表現形式**タブにある、**レポートでの桁**を使って、全体的に設定することができます。

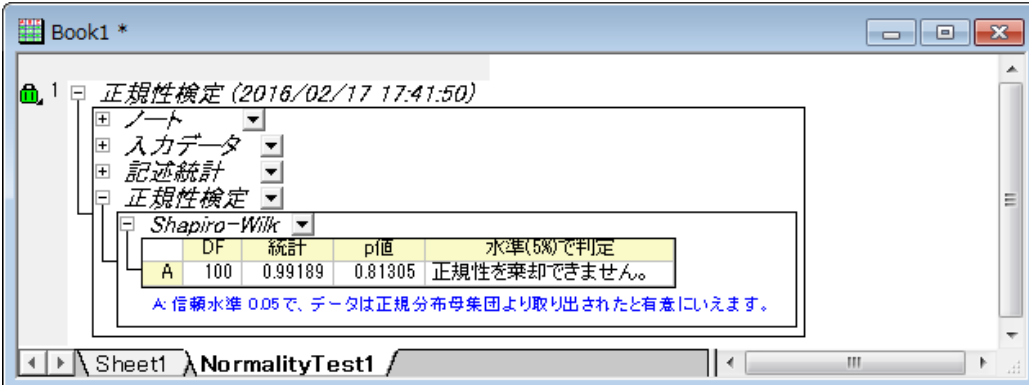
正規性の検定

1. **新規ワークブック** ボタン  をクリックして新しいワークブックを作成します。
2. A 列の **F(x)** ラベルの行でダブルクリックすると、セルの編集モードに移行します。次のように入力します。

```
nint(100+20*normal(100))
```

100 を中心としたランダムな整数が列に入力されます。

3. A 列をハイライトし、**統計:記述統計:正規性検定** をクリックしてダイアログを開きます。選択した列が自動的に**入力データ**に設定されます。デフォルト設定のまま、**OK**をクリックします。**正規性検定**のレポートシートが作成されます。**Shapiro-Wilk** テーブルの下にある表は、このデータが予測通りに通常分配されていることを示しています。





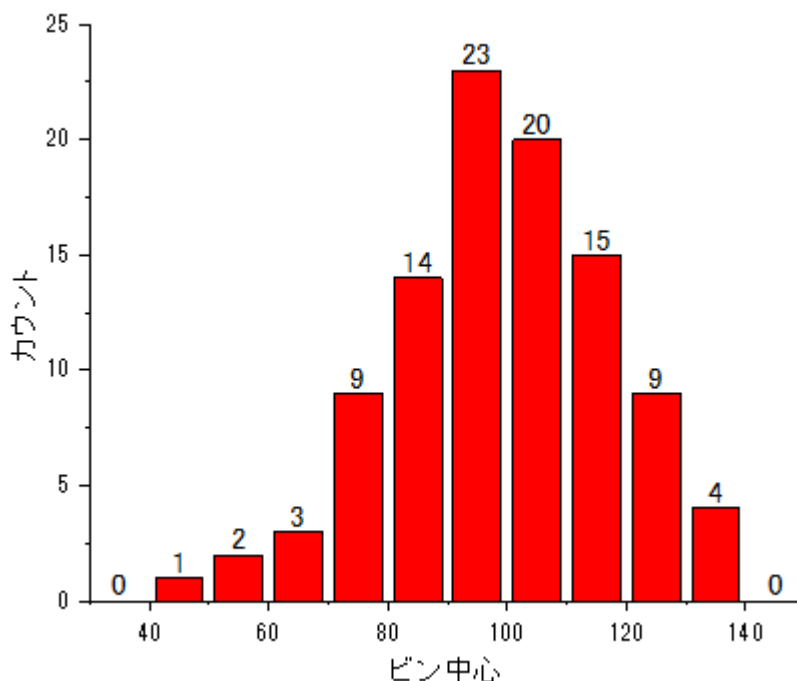
DF	統計	p値	水準(%)で判定	
A	100	0.99189	0.81305	正規性を棄却できません。

A: 信頼水準 0.05 で、データは正規分布母集団より取り出されたとは有意にいえません。

度数表


1. 前のセクションで作成したワークブックの **Sheet1** をアクティブにします。A 列をハイライトして選択した状態で、**統計:記述統計:度数表** をクリックします。
2. ダイアログの設定はデフォルトのままにして、**OK** をクリックします。

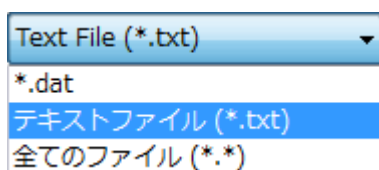
3. 結果シートで、列 **C(Y)** を選択します。2D グラフ ツールバーで、**縦棒** ボタンの隣に三角ボタン  をクリックします。
縦棒+ラベル  を選択して、ラベル付の縦棒グラフを作成します。ラベルでカウントしたヒストグラムが作成されます。



作図:統計グラフ メニューでは、ワークシートがアクティブな時に、複数のヒストグラム作図オプションを選択出来ます。**度数表** ツールは、最初に度数カウントを実行するための別の方法です。では、結果からヒストグラムを作図します。列にラベルを付け加えたりするような自由なカスタマイズ設定をここで設定することが出来ます。

一元配置の分散分析

1. 新規のワークブックを作成して、**単体 ASCII のインポート** ボタン  をクリックします。**ファイル検索** ダイアログが開きますので、<Origin EXE Path>\Samples\Statistics フォルダを開きます。**ファイル名** の隣にあるドロップダウンリストで、**テキストファイル(*.txt)** に変更します。



2. **Nitrogen.txt** を選択します。

3. メインメニューの **統計:ANOVA:一元配置** を選択して、**One Way ANOVA** ダイアログを開きます。入力 タブで、**入力データを インデックス** に設定します。因子 の右にある三角形のボタンを押して、**A(X): plant** を選択します。データの右にある三角形ボタンを押して、**B(Y): nitrogen** を選択します。



ANOVA ダイアログボックスでは、2つの入力モード、**インデックス** または **素データ値** があります。この2つのモードでデータがどのように扱われるかを、FAQ-333 インデックスデータおよび素データの変換方法のページで参照することができます。

4. ダイアログの **平均比較** タブにて、**Tukey** のチェックボックスにチェックを入れます。**プロット** タブに切り替え、**平均比較プロット** を選択します。**OK** をクリックしてダイアログを閉じ、レポートを作成します。
5. **ANOVA1Way1** レポートシートに移動します。結果から、次の結論が得られます。
 - ANOVA テーブル (**全般 ANOVA**) で、p 値が 0.05 よりも小さいので、4つのグループの内少なくとも2つが異なる平均値を持つことを有意に示しています。

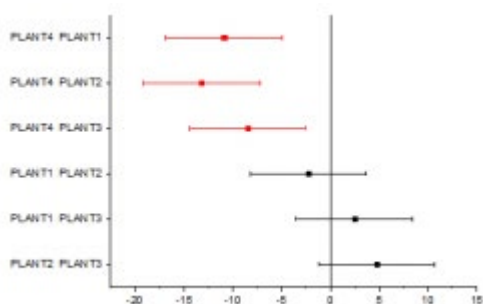
一元配置ANOVA

全般ANOVA

	DF	二乗和	二乗平均	F値	確率>F
モデル	3	1996.36652	665.45551	12.86214	6.99338E-7
誤差	76	3932.05317	51.73754		
合計	79	5928.41969			

帰無仮説: 全てのレベルの平均は相等しい。
 対立仮説: 1つまたはそれ以上のレベルの平均が異なっている。
 信頼水準0.05で、母平均は有意に異なっています。

- **平均比較プロット** の上でダブルクリックしてグラフを開きます。赤色のプロットが異なる平均値を示しています。**PLANT4** は最も小さい平均値をもち、他の3つのグループとは有意に異なっています。



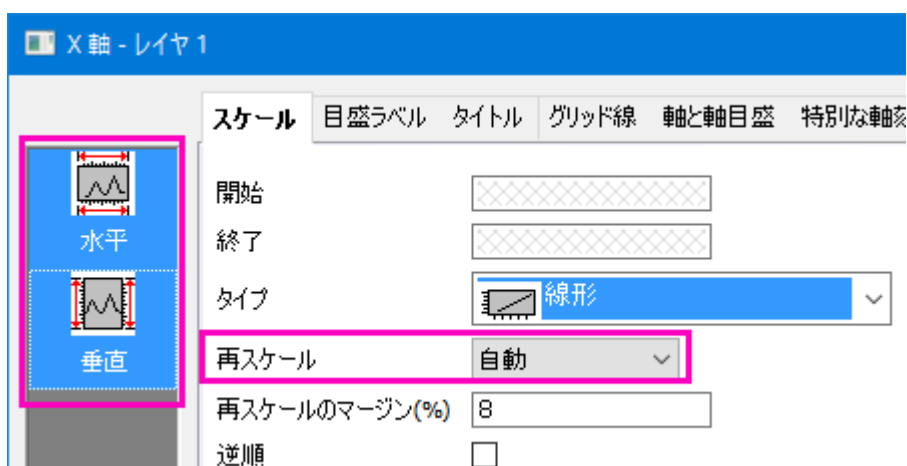
プロジェクトファイルを保存します。



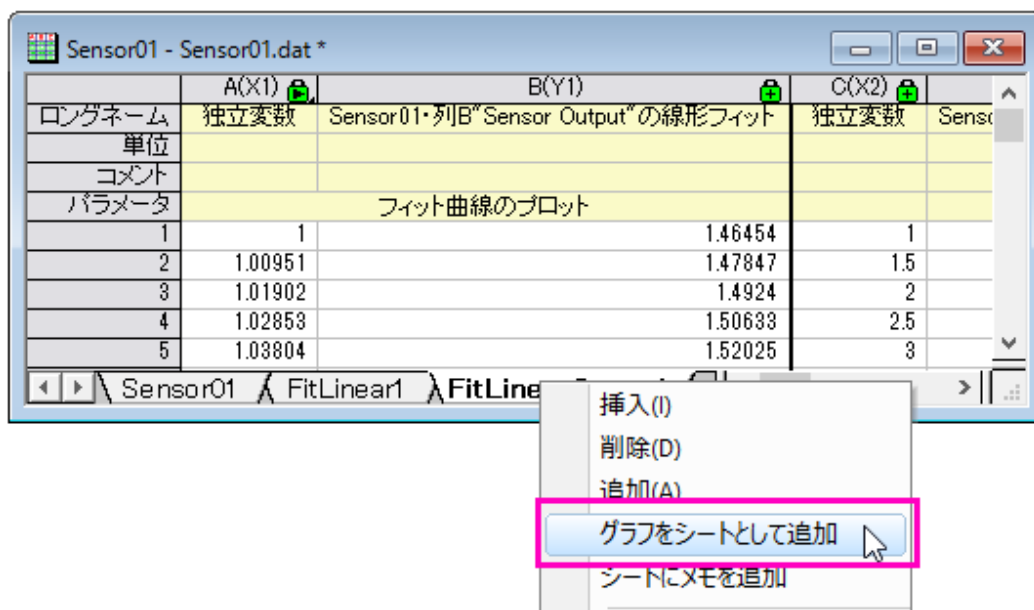
1.11. 分析テンプレート

このレッスンでは**分析テンプレート**を作成して新しいデータで再使用方法を学びます。

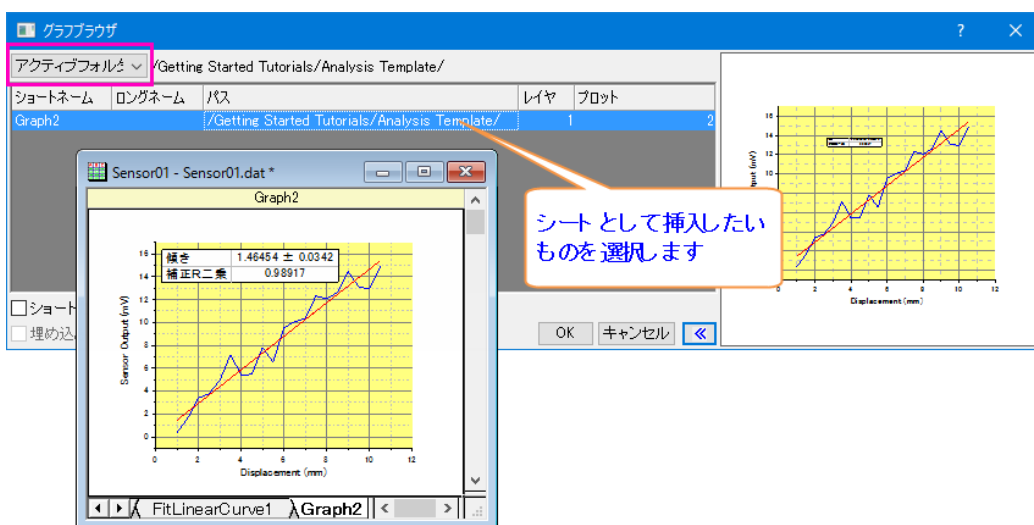
1. 前回のレッスンで保存したプロジェクトファイルを引き続き使用します。プロジェクトエクスプローラで**分析テンプレート**という名前の新しいフォルダを作成します。空のフォルダを開きます。
2. 新しいワークブックを開き、<Origin EXE Path>\Samples\Curve Fitting\Sensor01.dat ファイルをインポートします。
3. B 列を選択してから**作図: ユーザテンプレート: My Line**を選択し、レッスン 1 で保存したグラフテンプレートの *My_Line.otp* を利用して折れ線グラフを作成します。
4. グラフウィンドウをアクティブにし、メニューから**解析: フィット: 線形フィット**を選択します。**線形フィット**ダイアログが開きます。
5. **フィット制御**タブで**切片固定**チェックボックスにチェックを入れて、フィット曲線が強制的に(0,0)を通るようにします。**再計算**で**自動**を選択します。**OK** をクリックし、線形フィットを実行します。フィット曲線と結果テーブルがグラフに追加されます。
6. 結果テーブルを右クリックし、コンテキストメニューから**表中の値**を選択します。ダイアログで**傾き**と**補正 R 二乗**以外の**すべての内容を削除**します。**OK** をクリックして表を更新します。
7. X 軸をダブルクリックして、**軸**ダイアログボックスを開きます。**スケール**タブを開き、**Ctrl** キーを押しながら、左側のリストボックス内の**水平**と**垂直**の両方を選択します。**再スケール**を **自動** にして、**OK** をクリックします。これによってデータが変更される軸の範囲が自動的に更新されるようになります。




8. グラフの凡例を選択し、削除します。
9. 元のワークブックに戻ります。シートのタブのいずれか 1 つを右クリックし、コンテキストメニューから**グラフをシートとして追加**を選択します。



10. 開いた**グラフブラウザ**ダイアログで、場所を選択するドロップダウンリストから**アクティブフォルダ**を選択します。現在のフォルダには折れ線グラフのみ表示されます。そのグラフを選択して **OK** をクリックすると、グラフが埋め込みグラフとして新しいワークシートに挿入されます。



11. これでソースデータとすべての分析結果が1つのブックに収まりました。これを分析テンプレートとして保存してみましょう。メニューから**ファイル: ワークブックを分析テンプレートとして保存**を選択します。ワークブックを *My Sensor Analysis.ogw* という名前で保存します。

 どのワークブックでも、出力シートや列のロックで示される入出力をリンクしている操作があれば、分析テンプレートとして保存することができます。最も単純なサンプルは列値の計算が実行されているシートです。

12. **ファイル: 最近使ったブックメニューコマンド**を使用して **My Sensor Analysis.ogw** を開きます。分析テンプレートが開きます。データシート、結果、グラフが空であることに注意してください。

13. 1 番目のデータ用のワークシートをアクティブにし、<Origin EXE Path>\Samples\Curve Fitting\Sensor02.dat をインポートします。
14. 線形フィットツールで再計算モードを自動に設定していましたが、フィット結果と埋め込みグラフが自動的に更新されます。



分析テンプレートは手動で 1 度に 1 つのファイル进行处理するのに使用し、複数のデータファイルやデータセットの分析にはバッチ処理を使用します。詳しくはバッチ処理のチュートリアルを参照してください。

プロジェクトファイルを保存します。

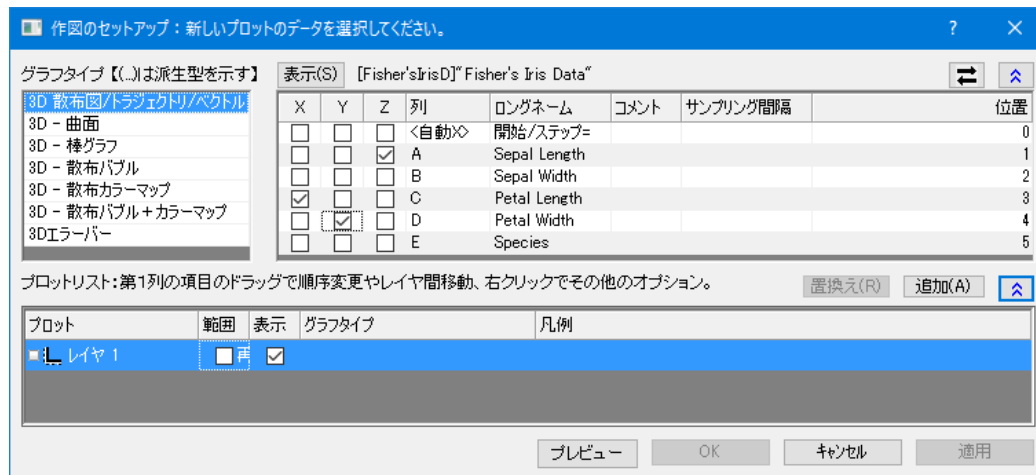


1.12. Origin アプリ

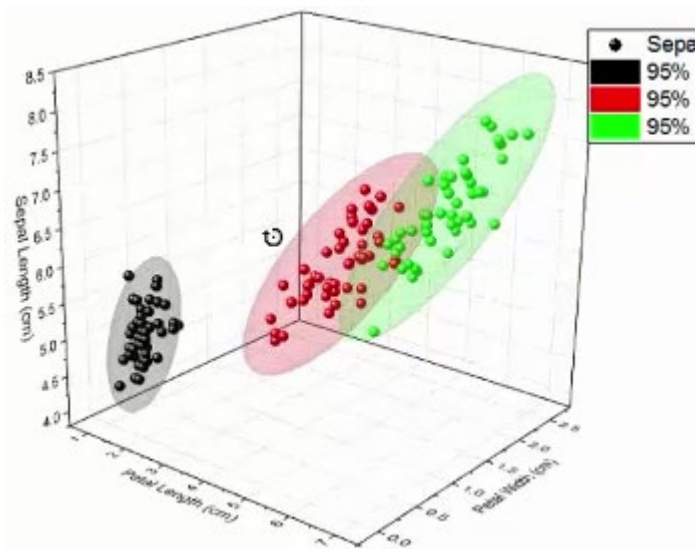
このレッスンでは OriginLab のウェブサイト**ファイル交換の場**からアプリをインストールして使用します。

1. 前回のレッスンで保存したプロジェクトを開き、プロジェクトエクスプローラのルートレベルに **3D Ellipsoid** という名前の新しいフォルダを追加します。
2. メインメニューから**ツール:「ファイル交換の場」のアプリ**を選択します。[ファイル交換の場ウェブサイト](#)から利用可能なアプリの一覧が表示されます。**3D Confidential Ellipsoid** を選択してこのアプリのウェブページを開きます。
NOTE:もしこのアプリがメニューのリストにない場合は、リストの最後のアイテムを選択してファイル交換の場のウェブページを開き、このアプリを探してください。
3. アプリのページでダウンロードボタンをクリックします。ダウンロードしたファイルがあるフォルダを開き、そのファイルを Origin のワークスペースにドラッグアンドドロップします。**3D Confidential Ellipsoid** という名前のアイコンが、ワークスペース右側にドックされている**アプリギャラリー**ウィンドウに表示されます。
4. <Origin EXE Path>\Statistics\Fisher's Iris Data.dat ファイルをワークブックにインポートします。
5. メインメニューから**作図: テンプレート: システムテンプレートライブラリ**を選択します。**システムテンプレート**ダイアログで、**Graph Template -> 3D Symbols & Bars & Vectors** ノードを開き、**gl3d** を選択します。ダイアログの左下にある**作図のセットアップ...**ボタンをクリックします。
6. 表示された**作図のセットアップ**ダイアログで、列 C、D、A をそれぞれ X、Y、Z としてセットします。**プロットリストを表示** ボタン  をクリックしてダイアログの下パネルを開き、**追加** ボタンをクリックしてから **OK** ボタンをクリックして 3D 散

布図を作成します。



7. 散布図をダブルクリックして**作図の詳細ダイアログ**を開きます。**シンボルタブ**で**色**ドロップダウンリストをクリックし、**ポイント毎**タブを選択します。**インデックス**をクリックして表示されたドロップダウンリストで **Col(E) "Species"**を選択します。**OK**をクリックしてダイアログを閉じます。
8. アプリギャラリーで **3D Confidential Ellipsoid** ボタンをクリックします。**Plot 3D Confidence Ellipsoid** ダイアログが開きます。初期設定のまま、**OK** ボタンをクリックし、3つの楕円体がグラフに追加され、それぞれ同じ色でデータのグループを覆っています。キーボードの **R** キーを押したままマウスを使用すると、自由に回転させることができます。



プロジェクトファイルを保存します。

この一連の **Getting Started** チュートリアルが Origin の主要機能の広範な紹介と導入に役立つと幸いです。興味関心のあるカテゴリのその他のチュートリアルでさらに学習を進めることを推奨します。



2 動画チュートリアル

Origin を簡単に始めるにあたり、次の表の動画を見る事ができます。

タイトル	説明
Origin の概要 Part1/ Part2	インポートしたデータから簡単に Origin を開始する、列ラベルの編集、複数パネルのグラフ作成、データの一部分を選択、積分の実行、ピークの検索とフィット、更新されたパラメータを再計算する方法を紹介します。
データをインポートする	ASCII ファイルのインポート、ASCII インポートダイアログのカスタマイズをして次回使用するために保存、インポートウィザードを使ってデータをインポート、インポートの設定を保存する方法を学びます。
グラフ作成 Part1/ Part2	グラフのツールバーを使ってグラフを作図する方法や作図の詳細ダイアログからデータを既存のグラフに追加やプロットのラベルに応じてグループに分けたりする方法を学びます。
グラフの編集	レイヤタイトルの追加、レイヤのサイズ変更、軸の設定を変更、グラフをテンプレートとして保存して再利用、テーマを使ってグラフのカスタム化、作図の順番の変更、データポイントの 1 点を変更する方法を学びます。
補間	線のつながりを変更してデータを補間し、その後補間ガジェットを使用してデータを読み取る方法を紹介しします。指定された XY 範囲から、与えられた X データを元に Y の値を推定する事もできます。
線形フィット*	外れ値を取り除いて線形フィットを行う方法を紹介しします。(英語のみ)
非線形曲線フィット	組み込み関数を使ってフィットを行い、パラメータ変更を使用して NLFit 設定を変更しします。そして、ユーザ定義関数を定義し、フィットする方法も紹介しします。
バッチ処理 Part1 (分析テンプレートの作成)	ワークブックを設定し、繰り返し行われる分析を線形回帰をモデルに紹介しします。
バッチ処理	分析テンプレートを作成する方法と、そのテンプレートを使用して複数のデータファイルを分析する方法を紹介しします。
OriginPro の機能	OriginPro で提供される拡張された解析ツールをピークフィット、曲面フィット、統計、信号処理、イメージ処理についての機能を紹介しします。

Note: Web サイトにある [動画チュートリアルページ](#) では最新かつ完全な動画チュートリアル一覧を確認できます。

3 ユーザーインターフェース

3.1. Origin の GUI

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 Origin のアプリケーション: タイトルバーとステータスバー](#)
- [4 ウィンドウ](#)
 - [4.1 アクティブ子ウィンドウによるダイナミックメニュー](#)
 - [4.2 ワークブック](#)
 - [4.3 グラフ](#)
 - [4.4 行列](#)
- [5 Origin のツールバー](#)
 - [5.1 ツールバーの詳細](#)
- [6 プロジェクトエクスプローラ](#)
 - [6.1 プロジェクトエクスプローラの表示/非表示](#)
 - [6.2 プロジェクトエクスプローラの表示プロパティを変更する](#)
 - [6.3 プロジェクトエクスプローラで Origin ウィンドウをブラウズ](#)
 - [6.4 プロジェクトエクスプローラにサブフォルダを追加する](#)
- [7 オブジェクトマネージャ](#)
 - [7.1 オブジェクトマネージャの表示/非表示](#)
 - [7.2 オブジェクトマネージャでレイヤとプロットを操作](#)
- [8 アプリ](#)
- [9 ラーニングセンター](#)
- [10 クイックヘルプ](#)
- [11 メッセージログ](#)

3.1.1. サマリー

このチュートリアルでは、Origin のワークスペースについて説明します。プロジェクトを作成するための様々な種類のウィンドウをはじめ、これらのウィンドウをプロジェクトエクスプローラで操作する方法、オブジェクトマネージャでレイヤとプロットを操作する方法、アプリギャラリーでアプリを管理する方法を学習します。

必要な Origin のバージョン: Origin 2016 SR0

3.1.2. 学習する項目

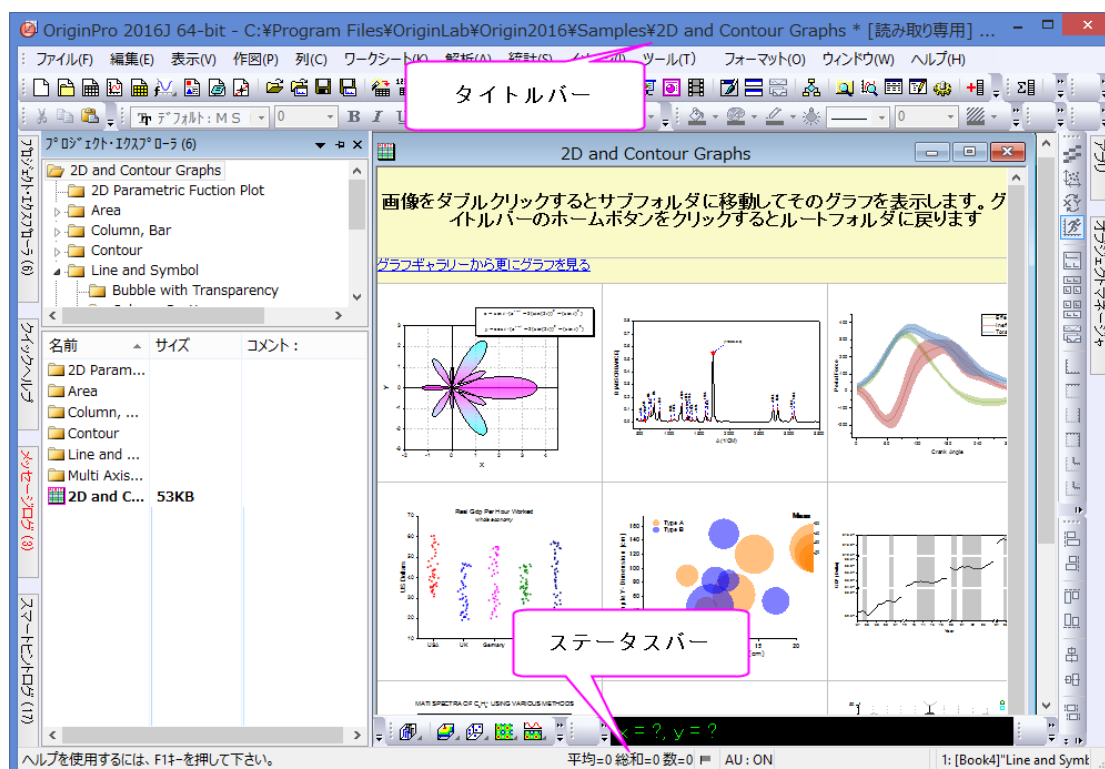
このチュートリアルでは、以下の項目について解説します：

- ワークブックを操作する
- グラフウィンドウを作成する
- プロジェクトエクスプローラーでワークスペースを管理する
- オブジェクトマネージャーでレイヤとプロットを操作する
- アプリギャラリーでアプリを管理する

3.1.3. Origin のアプリケーション: タイトルバーとステータスバー

Origin のタイトルバーには Origin(Pro)のバージョンと開いているプロジェクト名、プロジェクト内での現在のフォルダ名が表示され、移動やサイズ変更など標準のウィンドウ操作が可能です。

ステータスバーは、Origin のウィンドウ下部に配置され、メッセージや自動更新のステータス、選択したワークシートセルの統計的概要、子ウィンドウのテーマ、最後にアクティブだったワークブック、現在のウィンドウに対する角度の単位などが表示されます。





ステータスバー上で右クリックして開くコンテキストメニューで、バーに表示する項目を選択できます。ステータスバーに表示された基礎統計値は、右クリックして開くコンテキストメニューから統計をコピーを選択してコピーできます。コピーすると、名称と値はTABで区切られ、それぞれの値は改行コードで区切られます。

3.1.4. ウィンドウ

アクティブ子ウィンドウによるダイナミックメニュー

Origin のメニューはどの子ウィンドウがアクティブになっているかで、ダイナミックに表示が変わります。ヘルプやファイル、編集など、どの子ウィンドウでも表示されるものもありますが、メニューの内容が異なることがあります。

1. 標準ツールバーの新しいプロジェクトボタン  をクリックします。
2. ワークブックウィンドウがアクティブなウィンドウで、13 のメニューが表示されています。
3. 標準ツールバーの新グラフウィンドウボタン  をクリックします。新しいウィンドウ、**Graph1** が作成されます。11 のメニューが表示されました。

このように、どの種類の子ウィンドウがアクティブになっているかによって、状況に応じたメニューが表示されます。

Note: 新しいウィンドウを追加するには**ファイル:新規作成**を選択するか、標準ツールバーにあるボタンを使用します。子ウィンドウは、Origin のワークスペース内での移動やサイズ変更等の標準的な操作が可能です。ウィンドウメニューにはワークスペース内での子ウィンドウ表示を制御するオプション(重ねて並べる、整列等)があります。ワークスペースには以下のような子ウィンドウを開くことができます。

ワークブック - Origin のワークブックは、データを管理する基本構造となっています。Origin のワークブックは、1 つ以上の Origin ワークシート(最大 255)で構成されます。

グラフ - Origin には 60 種類以上のグラフタイプがデフォルトで用意されています。ワークシートセルにグラフを埋め込むこともできます。


行列 - Origin の行列ウィンドウはデータやイメージを入力するのに使用され、多くの 3D グラフの作図の際に必要です。

ノート - ノートウィンドウはテキスト入力のための Origin の子ウィンドウで、分析手順を記録したり、同僚や学生に注意事項を知らせたりする時に使用します。ワークシートセルに埋め込むこともできます。

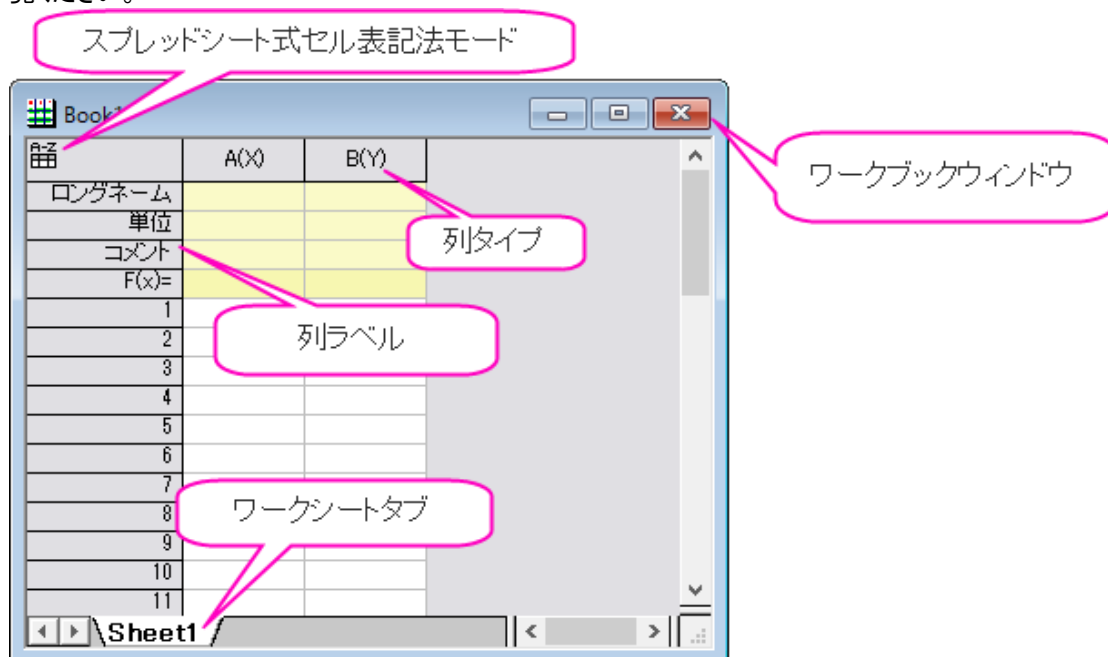
レイアウトと Excel ワークブック (Excel がインストールされている場合)

ワークブック

Origin のワークブックは、データを管理する基本構造となっています。Origin のワークブックは、1 つ以上の Origin ワークシートで構成されます。それぞれのワークシートは、通常、ひとつまたはそれ以上のワークシート列やデータセットで構成されます。Origin では、X、Y、Z、Error 等のいくつかの列タイプがあります。これらはグラフ作成の際に該当するデータをどのように扱うか決定する際に使用します。

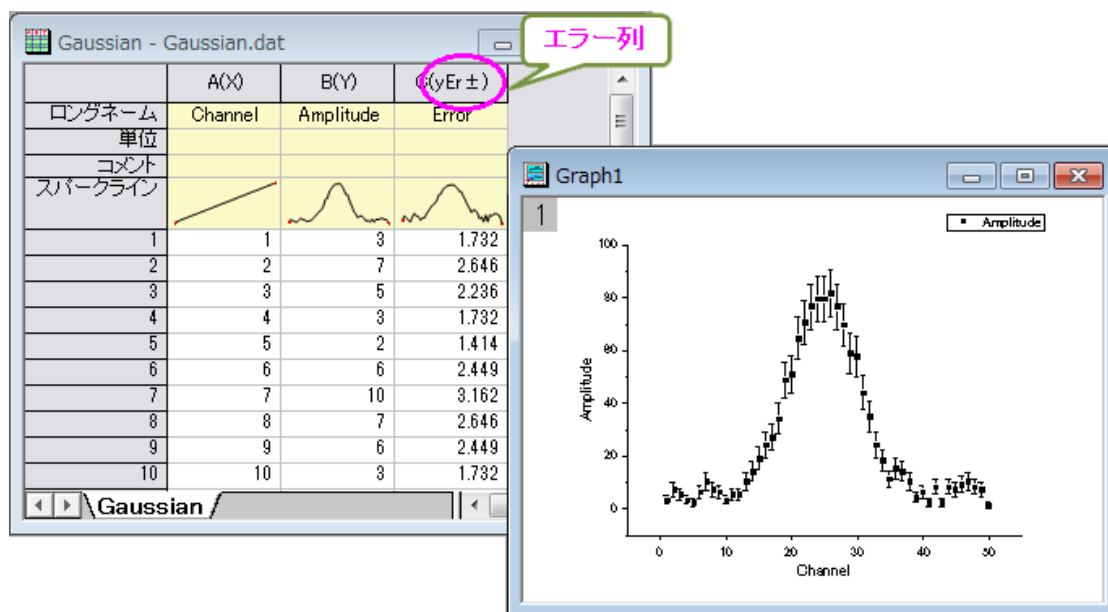
Origin のバージョン 2017 から**スプレッドシートセル表記アイコン**  が、ワークブックの左上にデフォルトで表示されるようになりました。簡単になったワークシートセル表記(Excel と同様に)このモードについての詳細は、チュートリアル**列値の設定**をご

ご覧ください。



以下の操作を実行し、Origin のワークブックの操作方法についての詳細を学習できます：

1. メニューから「**ファイル:新規**」を選び、「ワークシート」を選択して新しいワークシートを作成します。
2. **データ:ファイルからインポート:単一 ASCII ファイル** と選択し、**ASCII** ダイアログボックスを開きます。Origin のプログラムフォルダにある、`\Samples\Curve Fitting` までブラウズします。`Gaussian.dat` ファイルを選択し、**開く** ボタンをクリックして、ワークシートにデータをインポートします。
3. インポートの際、データの形状を素早く確認できるスパークラインが自動的に追加され、ファイル名がワークシート名として使用されます。また、必要に応じて列が追加され、データがインポートされます。ロングネームをみると、3 番目の列には、データエラーを表していることがわかります。この列を Y エラー列に設定するには、列のヘッダ部分をクリックして、列全体を選択し、右クリックして、ショートカットメニューから「**列 XY 属性の設定:Y エラーバー**」を選択します。
4. これにより、Origin では簡単にグラフを作図できます。列 B と C(Y と Y エラーデータ)を選択し、メニューから**作図:基本の 2D グラフ:散布図**と選択すれば、散布図が作成できます。



グラフ操作

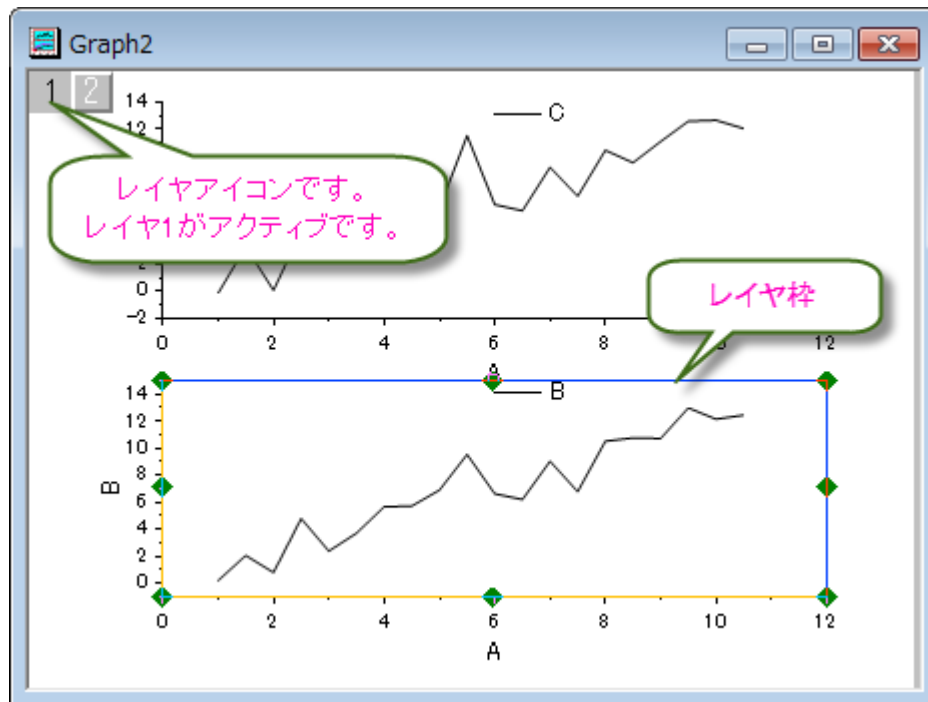
グラフウィンドウは、実験データや解析結果をグラフィカルに描写するためのコンテナです。グラフウィンドウには、1つのレイヤに1つのデータがプロットされることもあれば、複数のレイヤに複数のデータがプロットされていることもあります。

グラフレイヤは、Origin グラフの基本単位です。レイヤには、スケール値のセット、1つまたはそれ以上のデータプロット、テキストラベル、描画オブジェクト、グラフ凡例/カースケール、ボタンオブジェクトなどが含まれます。また、グラフレイヤは作成、サイズ変更、移動等が行えます。

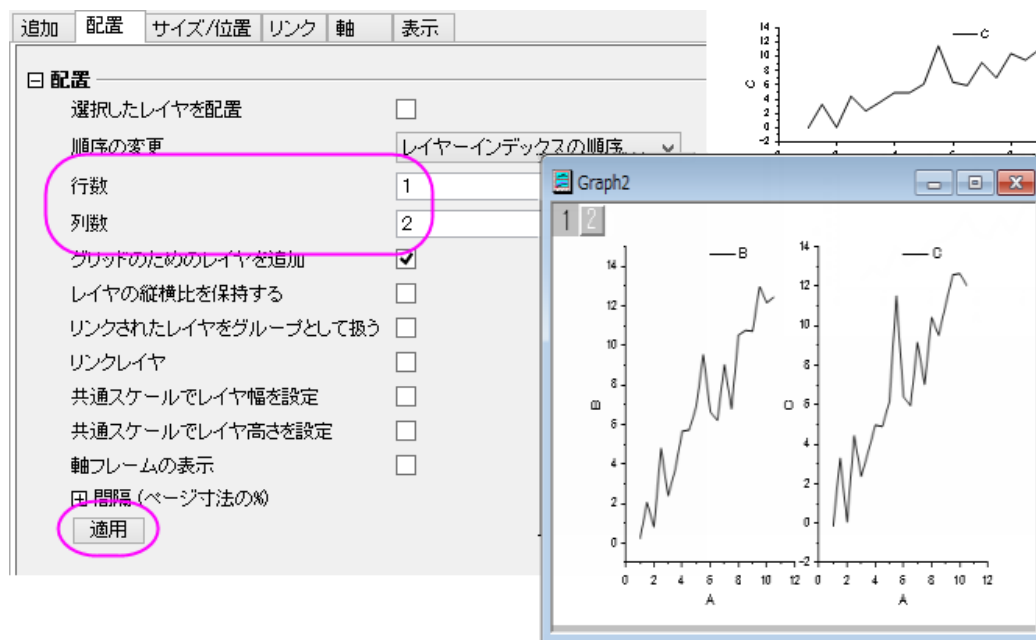
以下の操作をして、グラフウィンドウのレイヤを整理する方法を学びます。

1. 新しいワークブックを作成し、\Sample\Curve Fitting フォルダにある、Linear Fit.dat ファイルをインポートします。インポートされたデータには、3つのY列があり、それらはすべて一番左にあるX列に対応していることがわかります。
2. B、C列を選択して**作図: 基本の2Dグラフ: 垂直2区分**を選択してグラフを作図します。これが2レイヤのグラフです。グラフに複数レイヤがある場合、いつでも1つのレイヤのみアクティブできます。サイズ変更や、プロット色の変更等の操作はアクティブなレイヤに対して行われます。どのレイヤがアクティブであるか見るには、グラフウィンドウの

左上にある灰色のレイヤ n アイコンの中でどれが選択されているかで確認できます。



3. これら2つのレイヤを編集するには、グラフウィンドウをアクティブにし、**グラフ操作:レイヤ管理**を選択してダイアログを開きます。中央パネルにある、**配置**タブをアクティブにします。**列数**を2にします。**行数**を1にして**適用**ボタンをクリックします。**OK** ボタンをクリックすると、グラフレイヤが水平に並びます。



ほとんどの場合、データを集計し、操作するためにワークシートを使用し、データをプロットするためにグラフウィンドウを使用します。

行列

Origin の行列ウィンドウは、Origin の行列データを 1 つ、またそれ以上格納するためのものです。それぞれの行列ウィンドウは、1 つ以上の行列シートを含めることができ、行列シートは複数の行列オブジェクトを含むことができます。行列オブジェクトは、Z 値のベクトルです。Z 値は、その相対的な行および列の行列中の位置による X 及び Y の次元が互いに関連している。行列は、等高線図や色付き曲面図のような Origin の 3D グラフを作成する前段階のもので、3D データを表示したり、操作するのに使われ、さらに Origin の画像処理や画像分析を行うのに使われます。後のチュートリアルで 3D プロットを作成するために Origin の行列を使用する方法を説明しています。

3.1.5. ツールバー

カスタマイズツールバーダイアログボックスでは、ツールバーやボタンの表示/非表示を制御できます。

1. Origin メニューから**表示: ツールバー**を選択します。**カスタマイズダイアログボックス**が開きます。
2. 表示したいツールバーの横にあるボックスにチェックを付ければワークスペースに表示されます。
3. **ボタングループタブ**をアクティブにします。
4. グループリストから**自動更新**を選択し選択します。
5. 表示されたボタンをマウスでつかみ、**標準ツールバー**にある緑の同じマークのボタンの隣にドラッグします。ドラッグして順番を変更可能です。
6. **閉じる**ボタンを押します。

全てのツールボタンはドッキングされている位置からドラッグしてフローティングウィンドウとして表示させることができます。フローティングウィンドウでは、ウィンドウを非表示にするために X ボタンの横に追加制御機能があります。**プッシュピン**はウィンドウをドッキングし、必要に応じて最小化するかどうかを制御可能です。

ツールバーの詳細

以下が一般的なツールバーです:

標準ツールバー



ワークシートデータ操作ツールバー



グラフ操作ツールバー



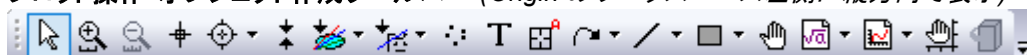
書式



スタイルツールバー



プロット操作・オブジェクト作成ツールバー (Origin のワークスペース左側に縦方向で表示)



2D グラフギャラリーツールバー



3D および等高線グラフツールバー



マスク操作ツールバー



3.1.6. プロジェクトエクスプローラ

プロジェクトエクスプローラは、Origin のプロジェクトファイルを効率よく、整理・管理するためのツールです。特に、ウィンドウがたくさんある場合に役立ちます。プロジェクトエクスプローラを使って、プロジェクトにあるウィンドウをフォルダ構造で管理することができます。

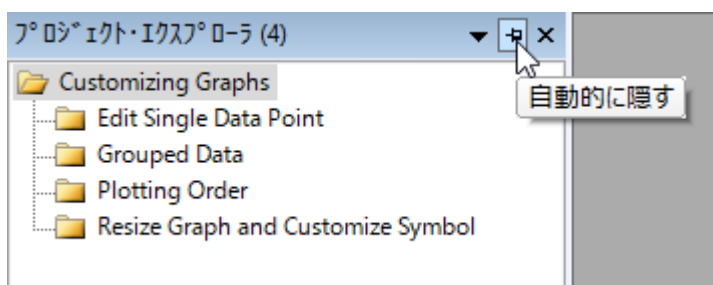
プロジェクトエクスプローラの表示/非表示

Origin をインストールして、最初に起動すると、プロジェクトエクスプローラはワークスペースの端に格納されます。ウィンドウの他の部分にドッキングすることや、ワークスペース内にフロートすることもできます。プロジェクトエクスプローラは、ワークスペースの一部を占めるので、プロジェクト内にフォルダを作成したら、プロジェクトエクスプローラを閉じたいと感じるかもしれません。プロジェクトエクスプローラを閉じたり、開いたりするには、全て隠すボタンを押すか、キーボードで **Alt + 1** を押すか、メニューから表示:プロジェクトエクスプローラを選択します。

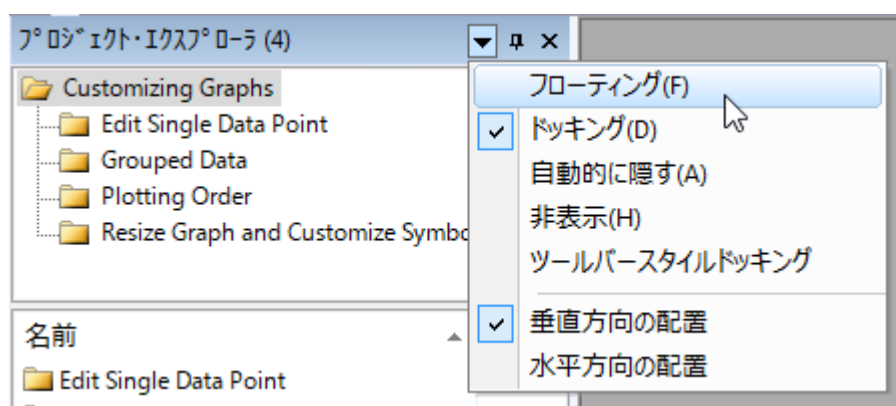
プロジェクトエクスプローラの表示プロパティを変更する

プロジェクトエクスプローラは自動的に隠す、非表示、フローティング、ドッキングから表示形式を選択できます。もうひとつの要素として、垂直または水平に揃えることも出来ます。

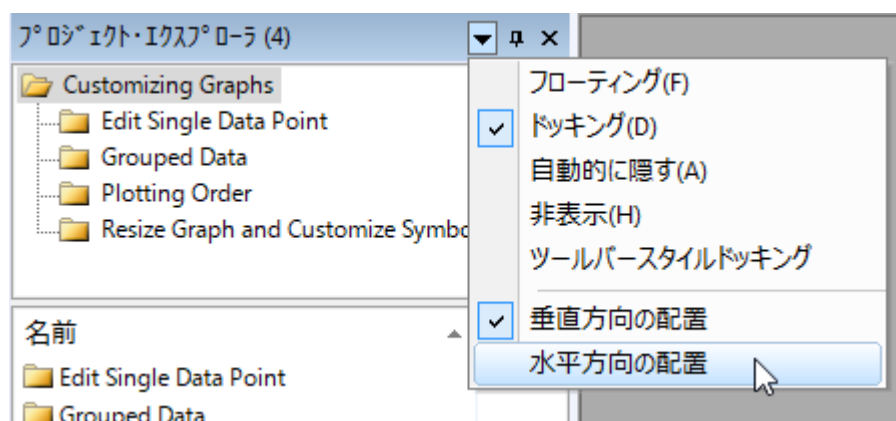
1. <Origin EXE Folder>\Samples\Graphing フォルダにある **Customizing Graphs.opj** を選択します。
2. デフォルトで、プロジェクトエクスプローラは自動的に隠されています。マウスのカーソルをワークスペースの左側にあるプロジェクトエクスプローラの上に移動して、展開します。
3. 常に表示するには、自動的に隠すボタン(画鋏の絵をしたボタン)をクリックしてプロジェクトエクスプローラをピン付けた状態にします。



4. ウィンドウの位置ドロップダウンでフローティングを選択すると、プロジェクトエクスプローラを自由に移動可能になり、好きな場所に配置できます。






5. フローティングになったプロジェクトエクスプローラのタイトルバーを右クリックし、**水平方向に配置**を選択します。

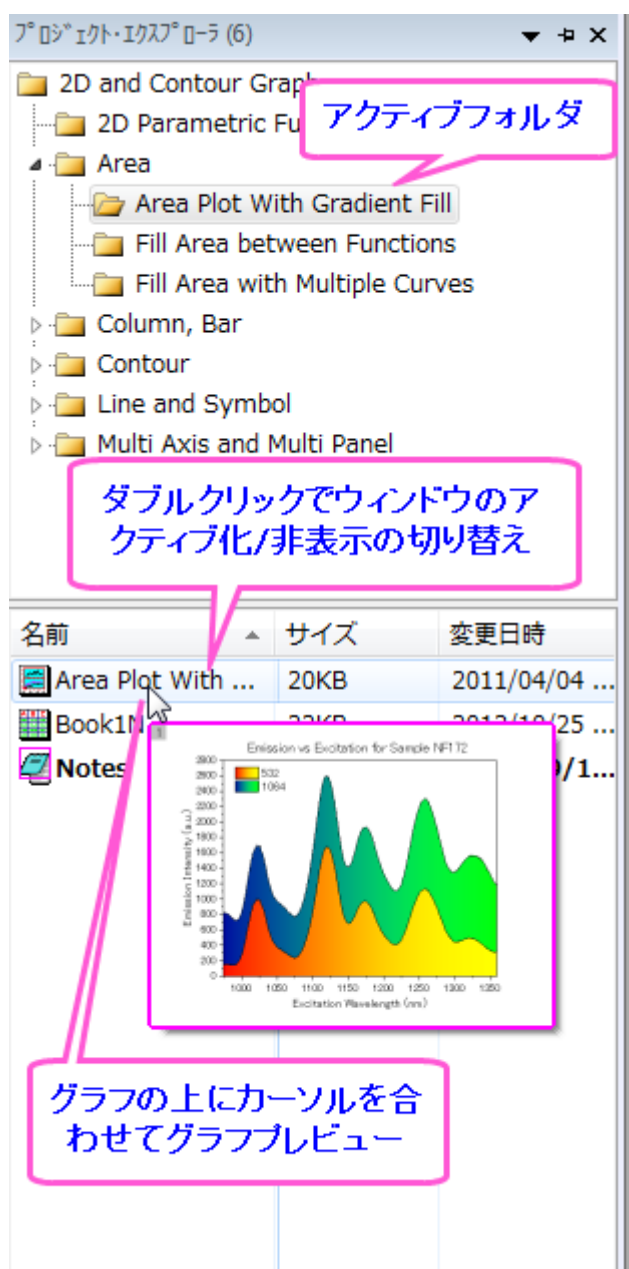


他のドッキング自在なウィンドウ（オブジェクトマネージャー、アプリ、クイックヘルプ、メッセージログ、スマートヒントログ等）も同様に表示プロパティを変更することが出来ます。

プロジェクトエクスプローラで **Origin** ウィンドウをブラウズ

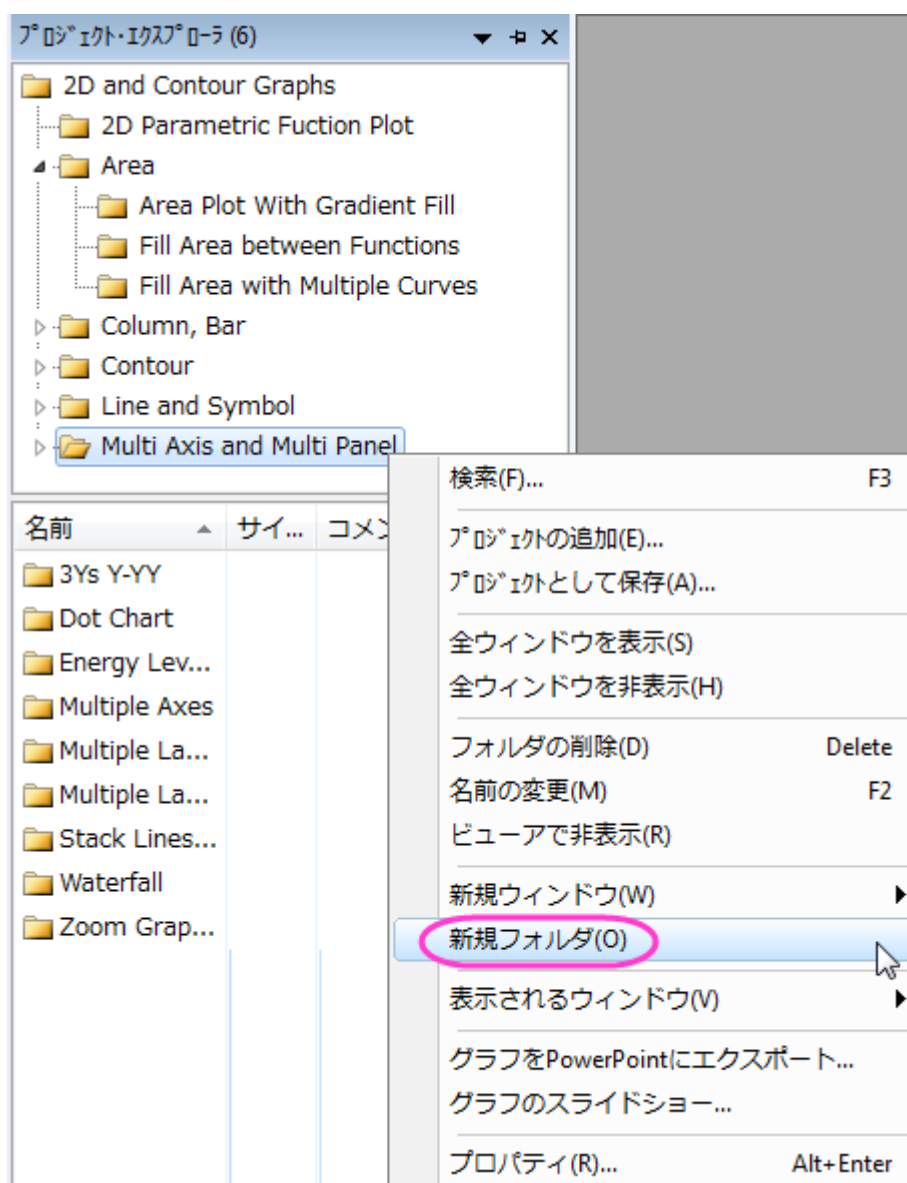
プロジェクトエクスプローラには、フォルダを表示する「フォルダパネル」とその内容を表示する「コンテンツパネル」の2つのパネル(領域)があります。コンテンツパネルにはアクティブフォルダ内のすべてのオブジェクトを表示します。新しい Origin のセッ

ションを開始して、「新規ワークブック」、「新グラフウィンドウ」、「新行列ウィンドウ」 のボタンをクリックすると空白のウィンドウを作成できます。コンテンツパネルには、これらのウィンドウアイコンが表示されます。アイコンをダブルクリックしてウィンドウを表示/非表示にします。



プロジェクトエクスプローラにサブフォルダを追加する

新しいフォルダを作成するには、フォルダパネル内のプロジェクトフォルダ(またはサブフォルダ)で右クリックし、ショートカットメニューから「新規フォルダ」を選択します。



サブフォルダを作成したら、プロジェクトエクスプローラウィンドウ内でドラッグ & ドロップして、各サブフォルダ間でウィンドウを移動することができます。

3.1.7. オブジェクトマネージャ

オブジェクトマネージャは、アクティブなグラフウィンドウにあるレイヤやプロットを見たり、操作したりするのを助ける階層構造を提供します。複数のレイヤを持つグラフや、複数のプロットを持つ個々のレイヤがある場合、特に便利です。

オブジェクトマネージャを開く/閉じる

Origin をインストールして、最初に起動すると、オブジェクトマネージャはワークスペースの右端に格納されます。プロジェクトエクスプローラと同様に、他の部分にドッキングすることや、ワークスペース内にフロートすることもできます。オブジェクトマネージャを開いたり閉じたりするには、メニューから表示: オブジェクトマネージャを選択します。

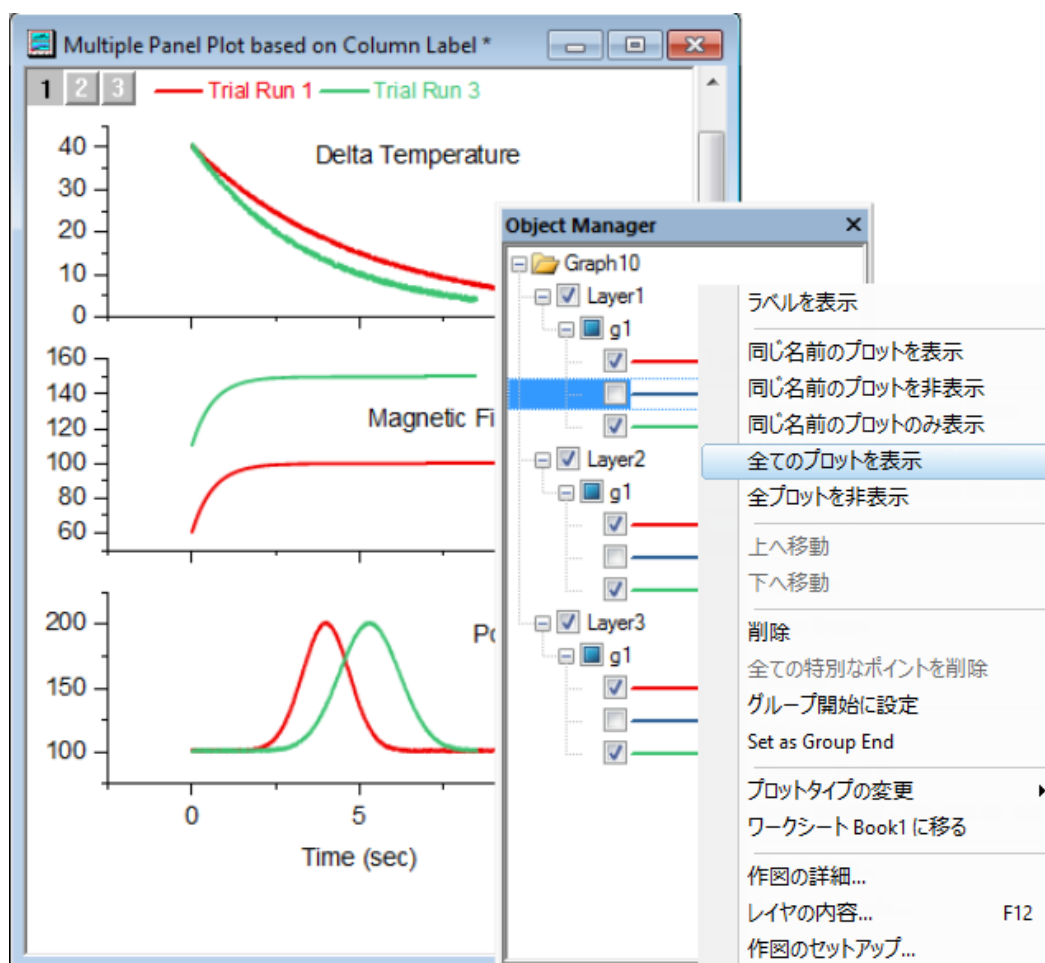
オブジェクトマネージャでレイヤとプロットを操作

アクティブなグラフウィンドウで、オブジェクトマネージャはインタラクティブに働きます。グラフウィンドウのレイヤまたはプロットを選択すると、オブジェクトマネージャの中の対応するアイテムが選択されます。逆も同様です (オブジェクトマネージャ

で選択した場合、対応するグラフウィンドウ内のレイヤまたはプロットが選択されます) アイテムを選択したり、表示/非表示を行うのが非常に簡単になります。

例として、次を試します。

1. (ヘルプ: ラーニングセンター メニューを選択、または キーボードの F11 キーを押して、ラーニングセンターを開きます。ダイアログの左パネルから**グラフサンプル**を選択し、サンプルドロップダウンリストから**複数区分グラフ**を選択します。*Multiple Panel by Column Label* サムネイルでダブルクリックして、サンプルグラフのプロジェクトを開きます。
2. グラフウィンドウのプロットオブジェクト(レイヤ、プロットグループまたは曲線)を選択すると、対応するアイテムがオブジェクトマネージャーでも選択されます。反対に、オブジェクトマネージャーでアイテムを選択すると、グラフウィンドウ内のオブジェクトが選択されます。
3. オブジェクトマネージャーで、Layer1 の *Trial Run 1* プロットの前にあるチェックボックスからチェックを外すと、このプロットを隠します。
4. Layer1 の *Trail Run 2* で右クリックし、**同じ名前プロットのみ非表示**を選択すると、2 という名前プロットが隠されます。
5. Layer1 の *Trial Run 2* プロットで再度右クリックし、**全てのプロットを表示**を選択すると、全ての *Trail Run 2* プロットが表示されます。

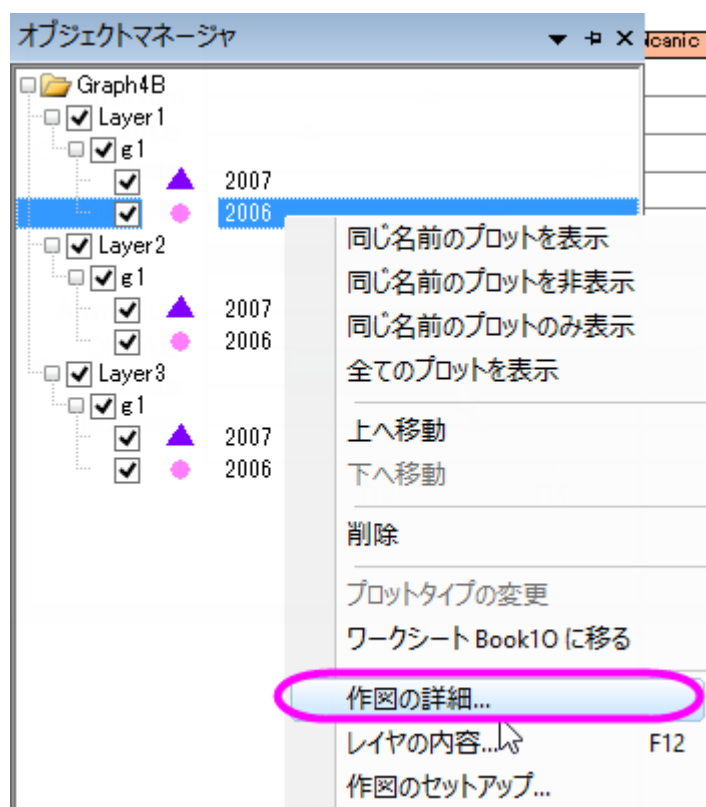




オブジェクトマネージャーのプロット名は、グラフの凡例に自動的に更新されます。同じ名前または、どの凡例更新モードを使用しているかには依存しません。

また、オブジェクトマネージャーでレイヤやプロットの表示/非表示を行うには、次のように行うことも出来ます。

- プロットの順番を変えるには、プロット上に右クリックし、**上に移動/下に移動**を選択します。
- プロットの種類を変えるには、プロット上で右クリックし、**プロットの変更**を選択します。
- 元のワークブックや行列に移動するには、プロット上で右クリックし、**(移動先名)に移動**を選択します。
- プロットの詳細ダイアログで、さらに編集を行ったり、コンテキストメニューで開く便利なダイアログを使うためには、アイテムの上でダブルクリックします。

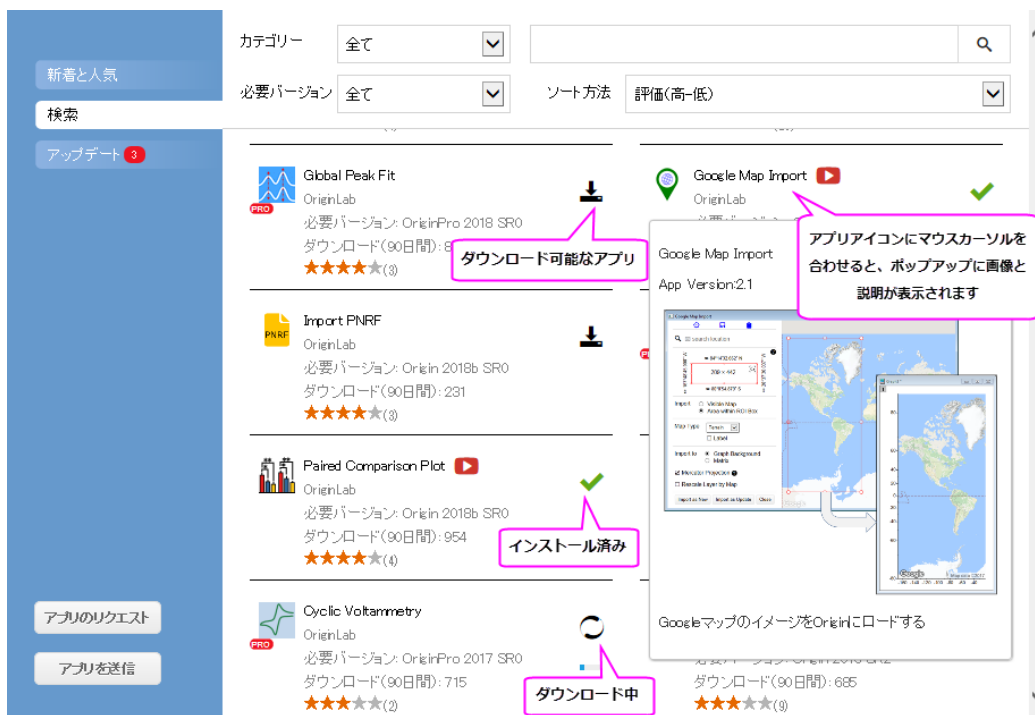


3.1.8. アプリ

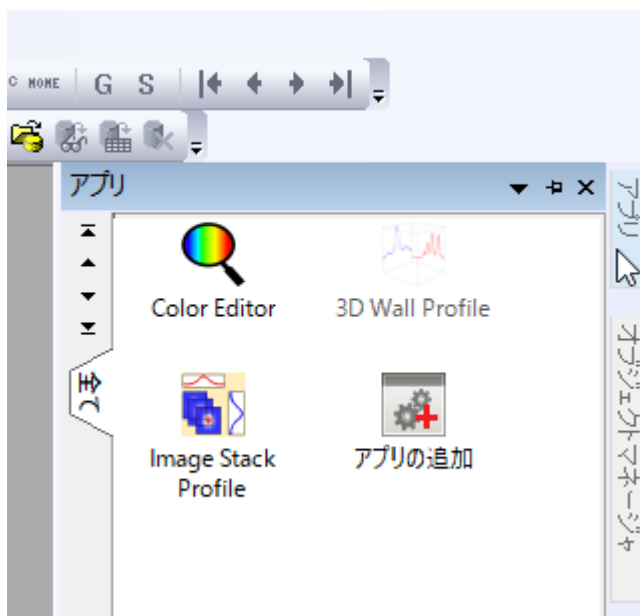
アプリ は、特別なグラフ作成や分析タスクを行うためのカスタムアプリケーションです。これらのアプリは、Origin にあらかじめインストールされてはいません。アプリを入手したい場合は、

- OriginLab の Web サイトにある [ファイル交換の場](#) ページを開いて、利用したいアプリを検索したり、ダウンロードしてインストールすることができます。

- アプリセンターを開き、(ヘルプ:アプリセンターを選択するか、F10 キーを押す、またはアプリギャラリーのすべてのタブに表示される**アプリの追加**ボタンをクリックする)、利用可能なアプリをキーワードとフレーズを使って検索し、ワンクリックでアプリをインストールすることができます。

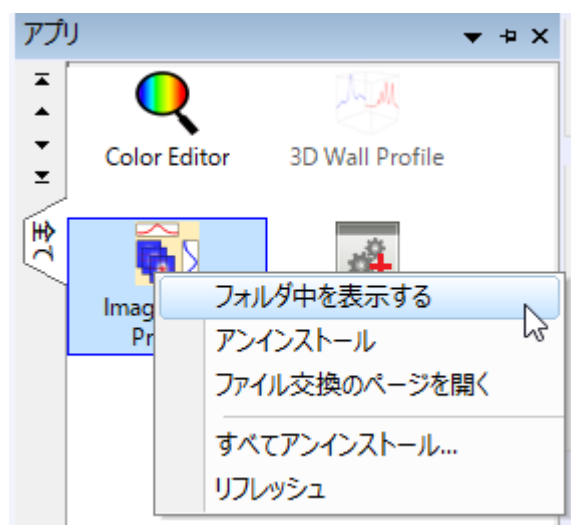


アプリがインストールされると、Origin インターフェースの**アプリギャラリー**ウィンドウで確認することができます。



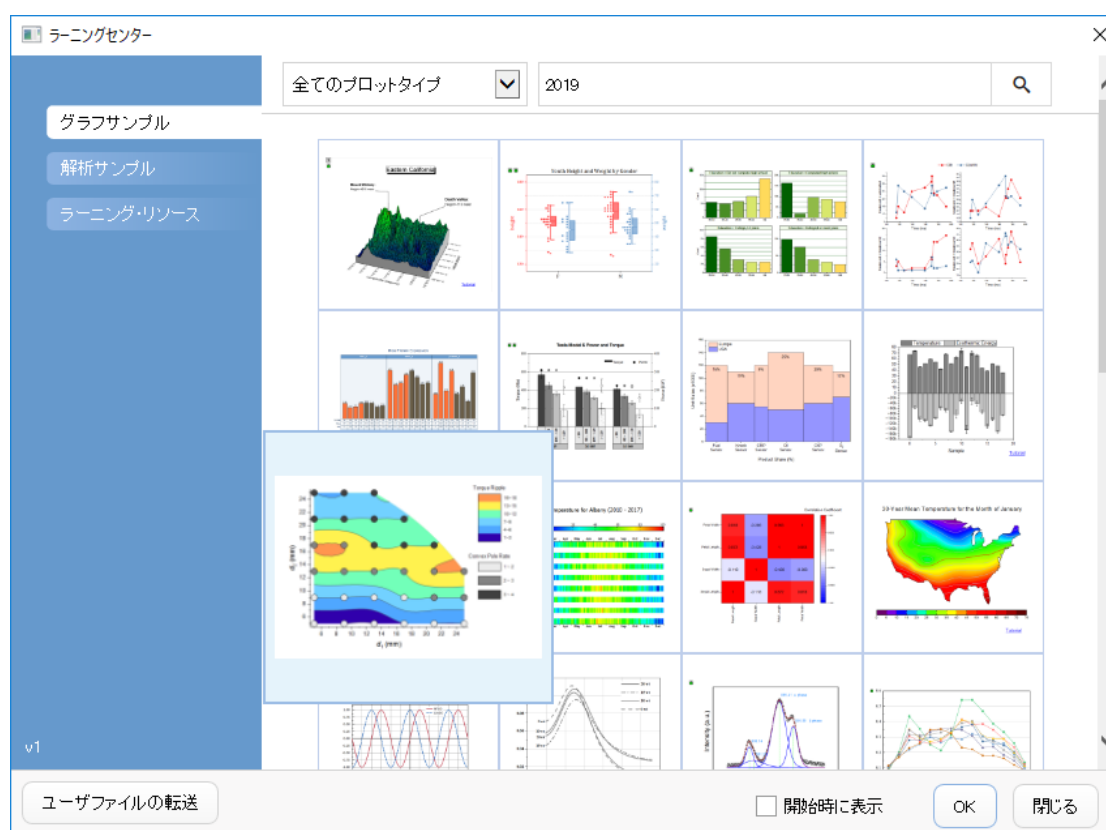
アプリ パネルでは、コンテキストメニューから新しいタブを追加することが出来、それぞれのタブにインストールしたアプリを振り分けることが出来ます。アプリギャラリーの「グラフ」、「解析」のタブをご覧ください。全てのアプリはインストール時に分かりやすいように**全て**タブに表示されます。

インストール済の全てのアプリはギャラリーウィンドウ中に表示されます。アプリを立ち上げるためには、アイコンをクリックします。アプリを隠したり、アンインストールする等の他のオプションを行うためにはアイコンを右クリックします。



3.1.9. ラーニングセンター

Origin Central / ラーニングセンターダイアログは、Origin を使い始めのユーザに最適です。メニューのヘルプ: **Origin Central / ラーニングセンター** を選択する、または F11 キーを押して開きます。



このダイアログを使って、次のことができます。

- グラフまたは解析サンプルを開く

- Origin を利用開始するためのラーニングソース
- ユーザファイルの移行

3.1.10. クイックヘルプ

クイックヘルプウィンドウは表示メニューで表示/非表示を制御できます。このウィンドウでは、キーワードを入力すると、一致する FAQ 項目がリストされます。

1. **クイックヘルプの全て隠す** ボタンをクリック、または**表示:クイックヘルプ** または **Alt + 5** キーを押して、**クイックヘルプ** ウィンドウを隠します。
2. **Alt + 5** を押して再度**クイックヘルプ**ウィンドウを表示させます。
3. **検索ボックス**に次のキーワードを入力します:**フィット結果**
4. 「**FAQ-144 既存のグラフにデータをプロットするには、どのような方法がありますか?**」でダブルクリックすると、該当の Origin のヘルプファイルが開きます。

3.1.11. メッセージログ

メッセージログは動作に関するメッセージ(出力、結果、エラーを含む)を表示します。スクリプトウィンドウやコマンドウィンドウに表示されないメッセージを表示します。メッセージログを閉じたり、開いたりするには、キーボードで **Alt + 6** を押すか、メニューから**表示:メッセージログ**を選択します。

1. 新しいワークブックを作成し、A 列と B 列を選択します。右クリックして**列値の一律設定:行番号**を選択します。
2. 2 列を選択したまま、メインメニューから**作図:基本の 2D グラフ:折れ線**と選択します。折れ線グラフが作成されます。
3. Origin メニューから**ファイル:グラフエクスポート**を選び、「**expGraph**」ダイアログを開きます。このダイアログで、デフォルトの設定のまま **OK** ボタンをクリックします。
4. メッセージログにエクスポート情報が表示されます。

4 データ分析

4.1. ガジェット

4.1.1. グローバル垂直カーソル

サマリー



垂直カーソルガジェットは積み上げグラフや複数グラフ間で X と Y の座標値を一度に読み取ることができます。

学習する項目

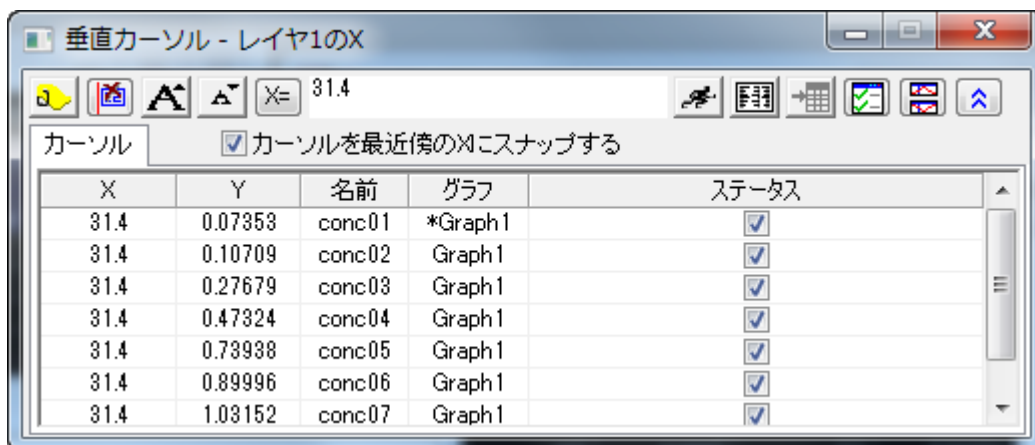
このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。



- 垂直カーソルガジェットを使って XY 座標の値を複数グラフで読み取り、結果を出力する
- 垂直カーソルガジェットを使ってグラフリンク/リンク解除を使う
- カーソルラインをリンクグラフ間で移動する

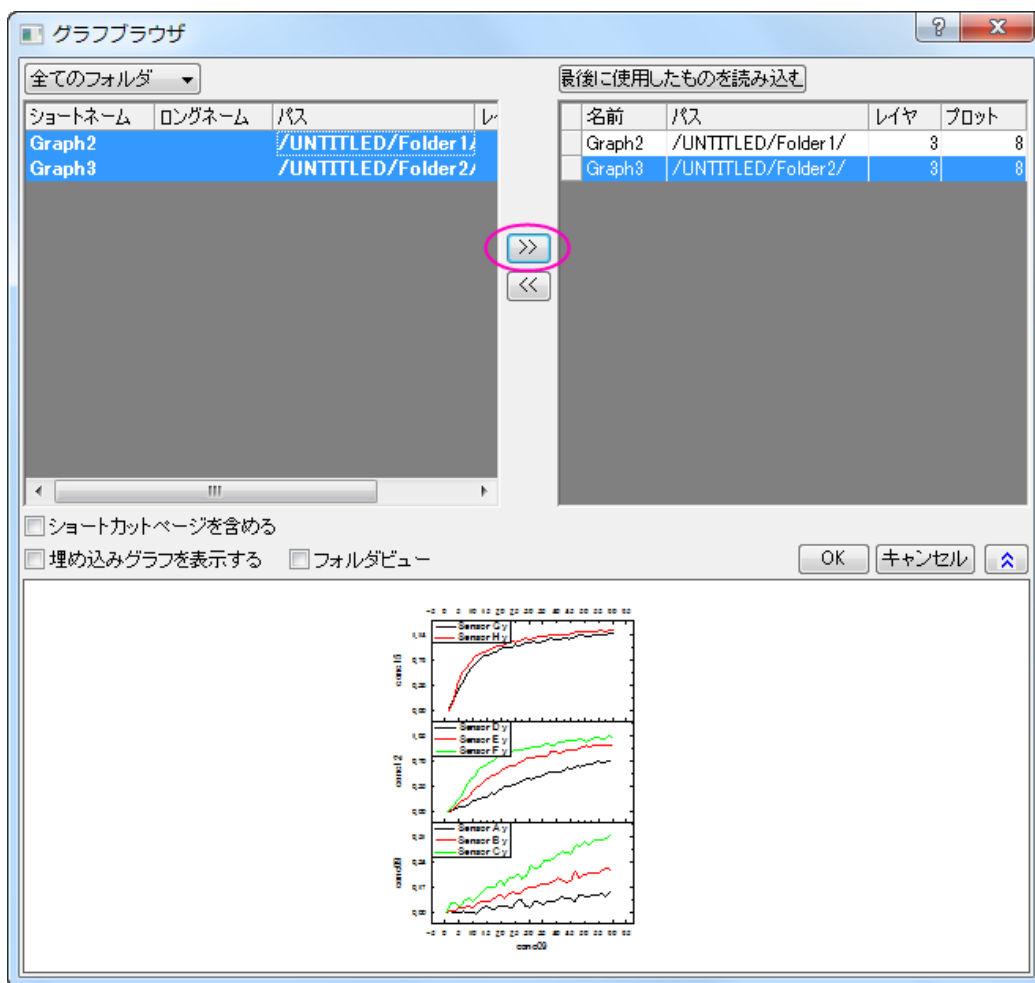
ステップ

1. Origin を起動して、**データ:ファイルからインポート:インポートウィザード**と操作します。データソースで<Origin Folder>/Samples/Curve Fitting のフォルダを参照し、**Step01.dat** ファイルを追加します。すると、インポートフィルタで**データフォルダ:Step** が自動的に選択されます。インポートモードを**ブックを新たに作って読み込む**に設定します。
2. **進む**ボタンをクリックし、**ファイル名オプション**ページに進みます。**ブックのロングネームのみ名前変更する**のチェックを外し、**完了**ボタンをクリックします。すると 2 つのワークブックそれぞれにデータが入り、インポートフィルタによって自動的に XYXY の属性が割り当てられます。
3. **標準ツールバーの新規フォルダ**ボタン  をクリックし、このプロジェクトに新しいファイルフォルダを追加します。このフォルダを開くと、フォルダ名は Folder 2 となっています。
4. Folder 2 を開いた状態で、**標準ツールバーのインポートウィザード**ボタン  をクリックし、<Origin Folder>/Samples/Curve Fitting のパスにある **Step03.dat** ファイルをステップ 1 と 2 のようにインポートします。
5. **プロジェクトエクスプローラ**で Folder1 を開きます。ロングネーム **Step01.dat** のワークブックをアクティブにし、ワークシート全体を選択します。**作図:基本の 2D グラフ:積上げグラフ**をメニューアイテムから選択し、**plotstack** ダイアログを開きます。
6. **プロット**割り当てブランチを開き、**各レイヤ中のプロットの数**に 3 を入力します。その他の設定はデフォルトのまま **OK** をクリックして積上げグラフを作図します。

- 他のワークブックも同様に積上げグラフを作図します。これで Graph1、Graph2、Graph3 がワークブック Step01.dat、Step02.dat、Step03.dat に対応して作成されました。
- Graph1 をアクティブにし、**ガジェット:垂直カーソル**と選択して**垂直カーソル**ダイアログを開きます。




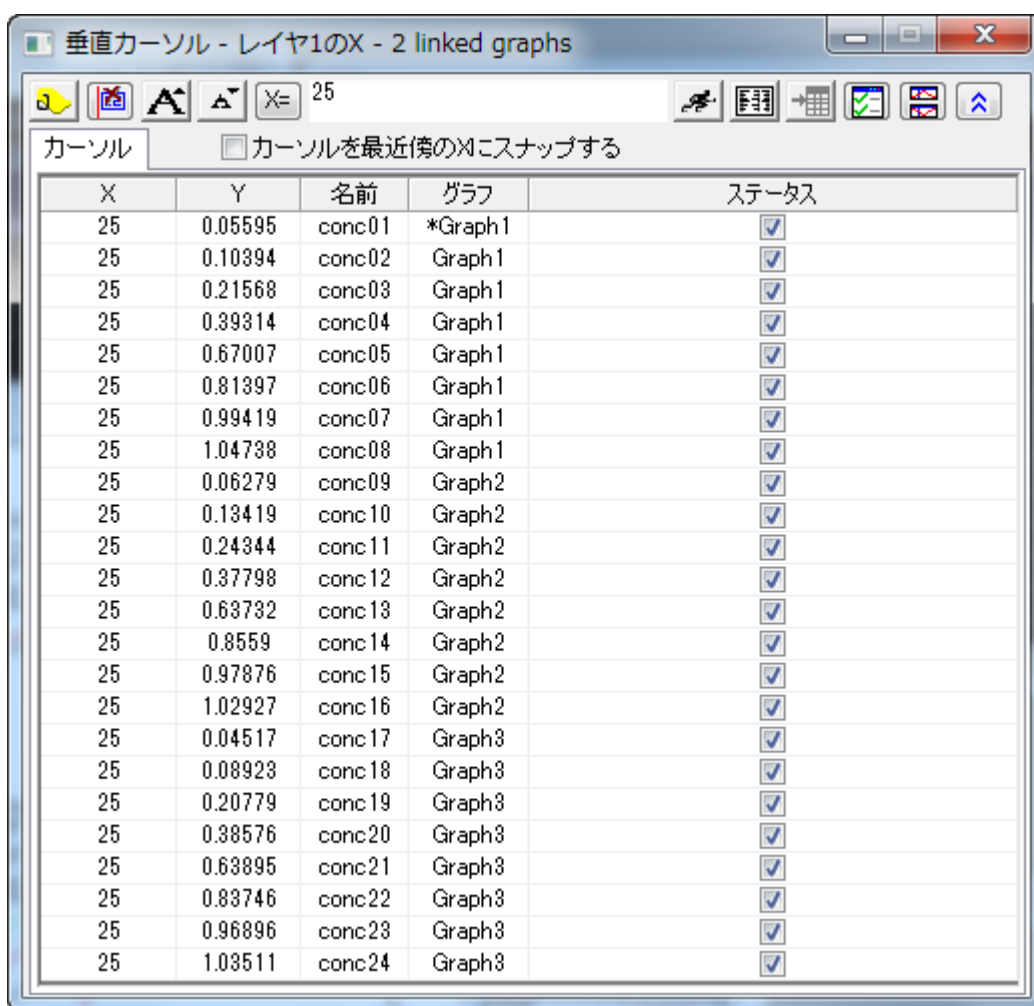
- ダイアログの**グラフリンク/リンク解除**ボタン  をクリックすると、**グラフブラウザ**が開きます。ここで、現在のアクティブグラフとリンクまたはリンク解除するグラフを選ぶことができます。
- 左側パネルで Graph2 と Graph3 を選択し、 ボタンをクリックしてこの 2 つのグラフを Graph1 とリンクさせます。**OK** をクリックします。








Note:このダイアログでグラフのリンクを解除する場合、右側パネルから <<< ボタンを使用します。

リンクされたグラフウィンドウの右上角には、それぞれ  アイコンが表示され、リンクされている事を示します。

- Graph1 がアクティブかつ、**垂直カーソル**ダイアログが開いていることを確認します。グラフ名の前のアスタリスクは、カーソルが置かれている現在アクティブなプロットを示します。X 値として **25** を入力し、カーソルを**最近傍の X にスナップ**するのチェックを外します。それからカーソルを X に**移動**ボタン  をクリックすると各プロットで X=25 の時の値を表示します。



12. タグとラベルを追加ボタン  をクリックして、全てのリンクしたグラフで X=25 の値にタグを付けます。
13. 結果出力ボタン  をクリックしてからレポートシートに行くボタン  を押すと新しい結果シートを生成します。全てのリンクされているグラフの XY 座標が、レポートシートに表示されます。
14. Graph2 をアクティブにして  アイコンをクリックします。そしてここへカーソルラインを移動を選択してカーソルを Graph2 に移動します。
15. 垂直カーソルダイアログ内で Graph3 に属するどれかの行をダブルクリックしてグラフウィンドウをアクティブにします。先程追加されたタグを選択し、Delete キーを押して削除します。  アイコンをクリックしてウィンドウのカーソルラインへ移動を選択すると、現在カーソルがある Graph2 を表示します。リンクグラフのタグが削除されている事が分かります。

4.1.2. 積分ガジェット

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 積分を行い分量を出力する](#)
- [4 グラフの基線と共に積分する](#)

サマリー

積分ガジェットはデータプロットの数値的積分を行い、曲線以下の面積を計算します。グラフ上に表示されるデータプロットの任意の位置をガジェットの「関心のある範囲(ROI)」で選択して積分できます。

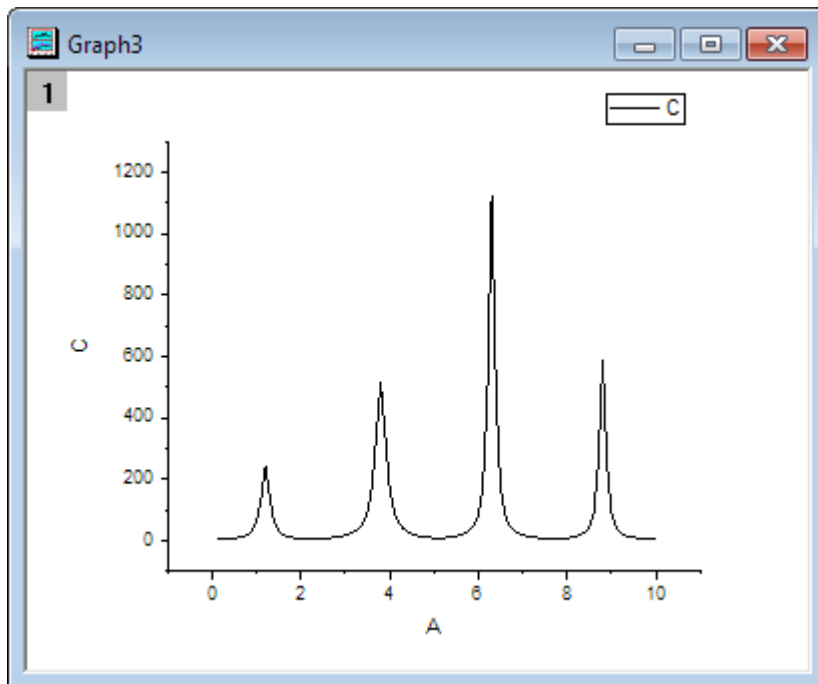
学習する項目

- 四角形の範囲で簡単に積分する
- 積分の制限と基線を指定する
- ROI ボックス内で積分曲線を表示する
- ピークの範囲、ピークの高さ、ピークの中心、FWHM などのパラメータを計算する

積分を行い分量を出力する

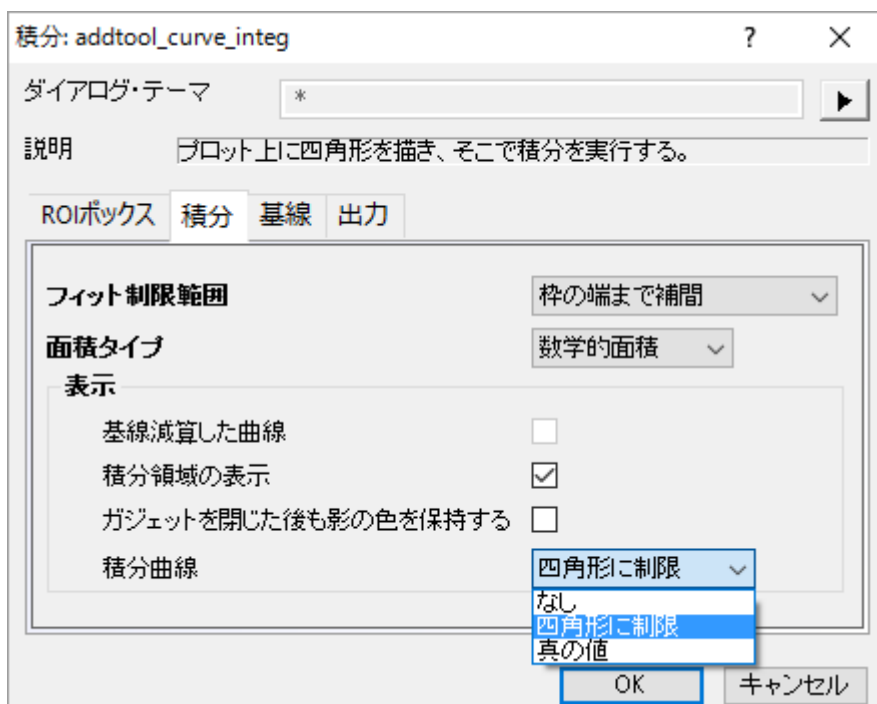
1. 新規ワークブックを開始して、<Origin プログラムフォルダ>Samples\Curve fitting にある Origin のサンプルデータ、*Multiple Peaks.DAT* をインポートします。

2. Col(C)を選択し、**作図: 線図: 線図**を選択してグラフを作図します。

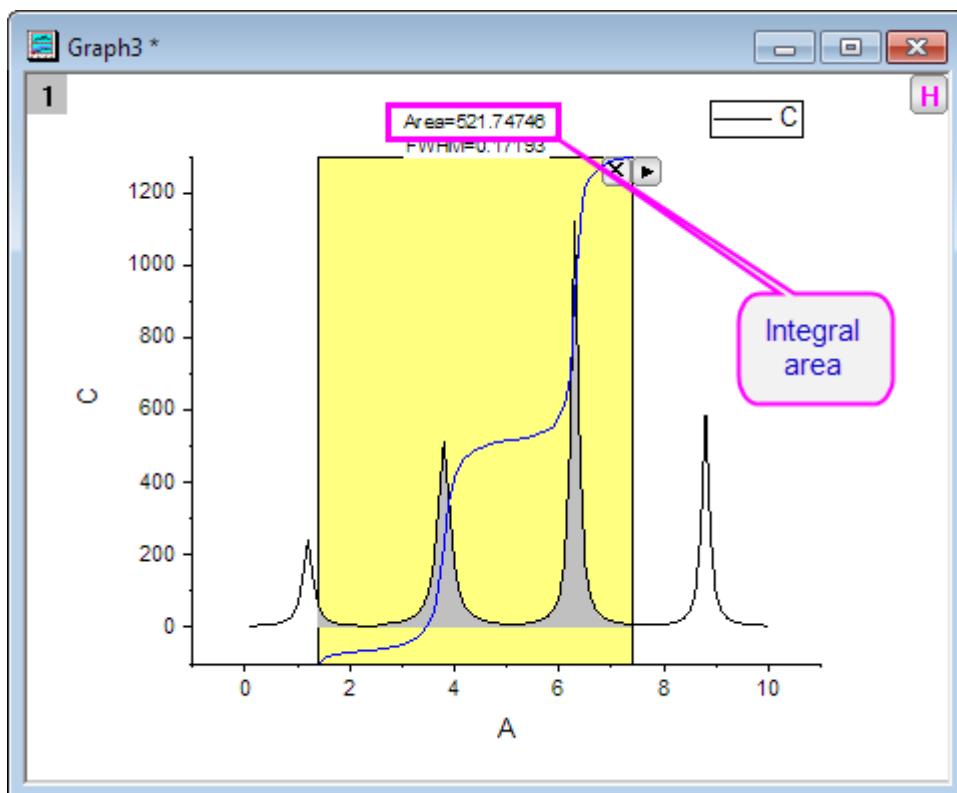


3. グラフウィンドウをアクティブにして、Origin メニューから**ガジェット: 積分**を選び、**積分: addtool_curve_integ** ダイアログを開きます。

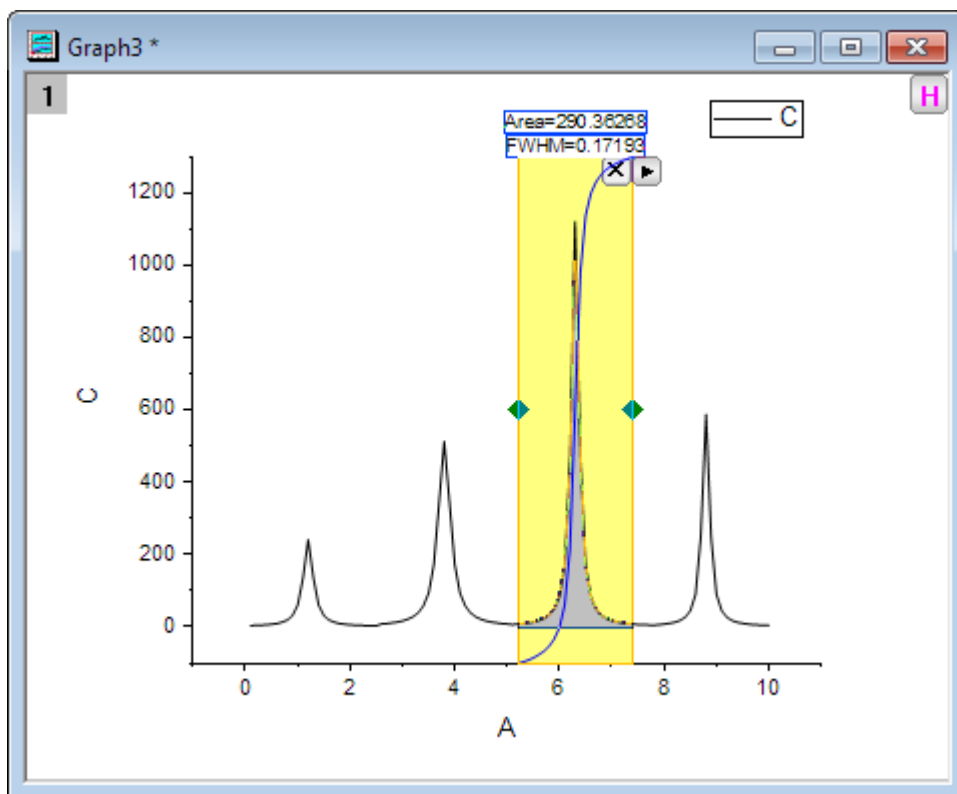
積分タブで**積分曲線**ドロップダウンリストから**四角形に制限**を選択し、四角形の内部に積分曲線を表示します。




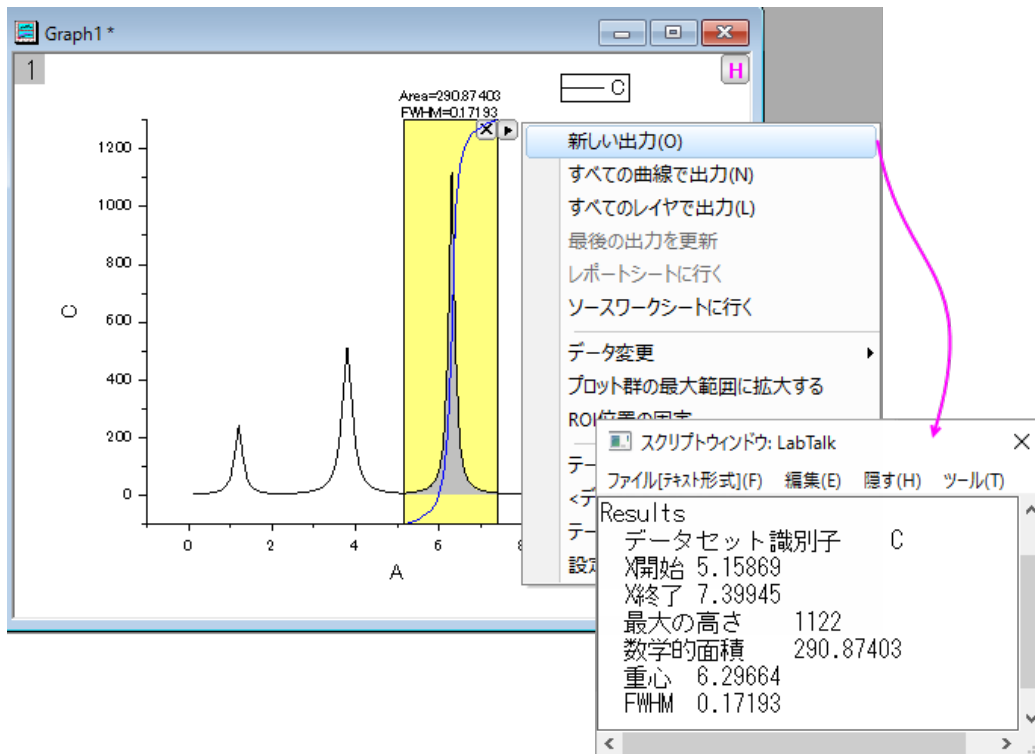
4. **OK** ボタンをクリックします。黄色い四角形と青い積分曲線がグラフの上に追加されました。積分範囲は灰色で着色され、その値が長方形の上部に表示されます。



5. 黄色いROIボックスを移動して、積分を行いたい1つのピークに合わせます。

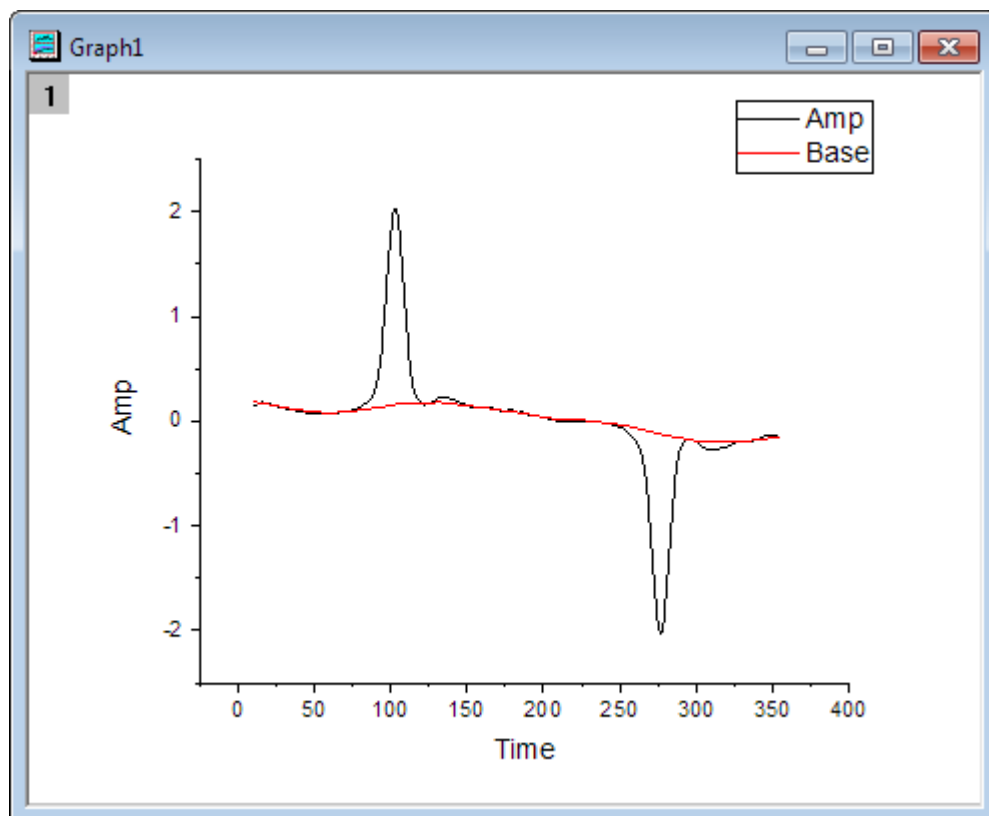


6. ROI ボックスの右上角にある三角形のボタン  をクリックして、フライアウトメニューから新しい出力を選択します。スクリプトウィンドウにガジェット: 積分結果が表示されます。

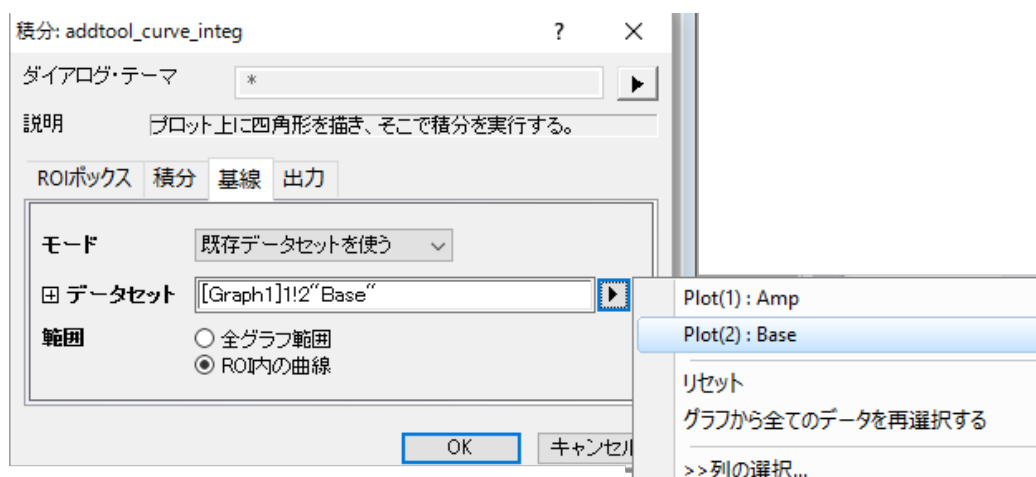



グラフの基線と共に積分する

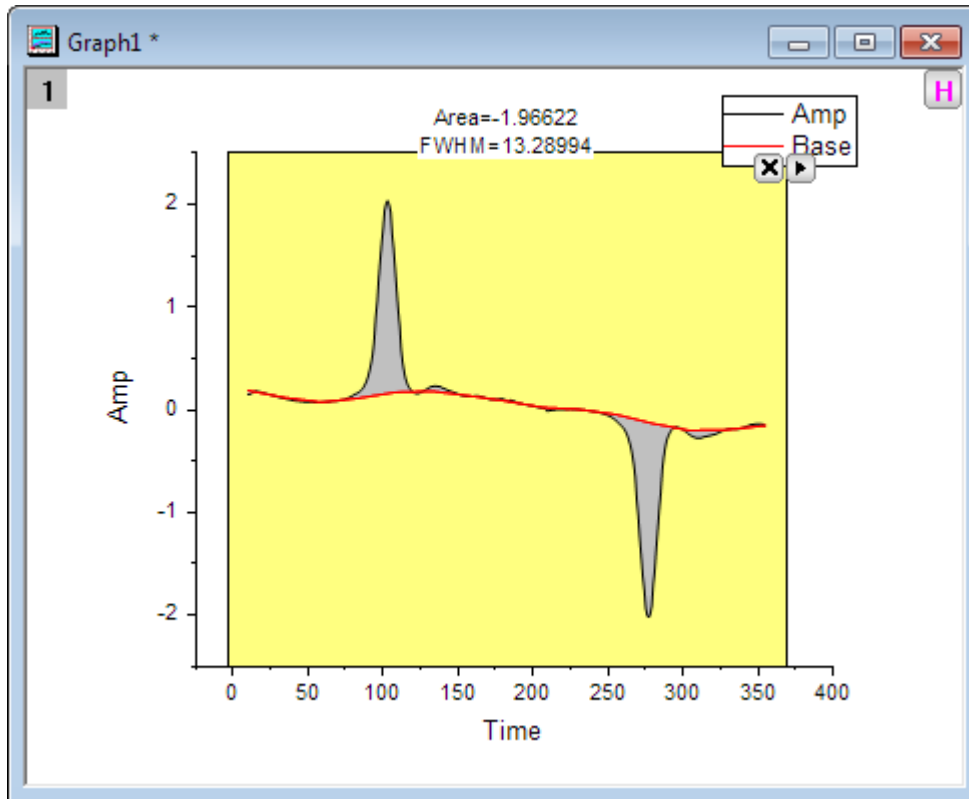
1. 新しいワークブックを開き、\Samples\Spectroscopy\ Peaks with Base.DAT ファイルをインポートします。
2. Col(B)と Col(C)を選択して、**作図: 線図: 線図**を選択してグラフを作図します。



3. グラフウィンドウをアクティブにして、Originメニューから**ガジェット: 積分**を選び、**積分: addtool_curve_integ** ダイアログを開きます。
4. **基線**タブで**モード**として**既存のデータセットを使用**を選びます。**Plot(2): Base**を**データセット**として選択し、**OK** ボタンをクリックします。



5. 三角形ボタン  をクリックし、**プロット群の最大範囲に拡大する**をフライアウトメニューから選択し、曲線全体を積分します。



4.1.3. 交差ガジェット

サマリー

グラフィケヤ内に2つ以上の曲線がある時、これらの曲線の交点を計算する事もあるでしょう。Origin8.6より、新しい**交差ガジェット**が追加され、グラフ上の曲線の交点が計算できるようになりました。

必要な Origin のバージョン: Origin 8.6 SR0 以降

学習する項目

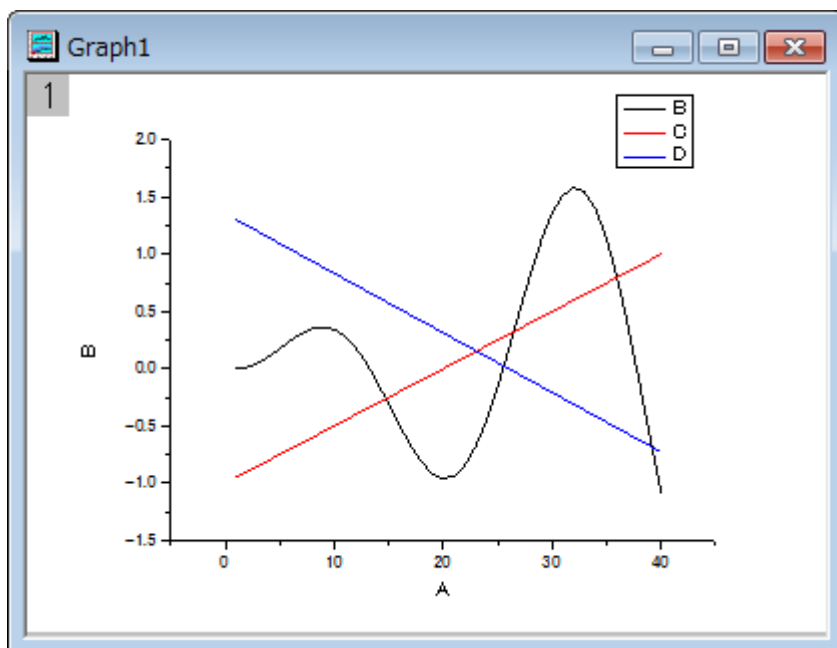
このチュートリアルでは、以下の項目について解説します。

- グラフ上で交差ガジェットを使用する
- 交点にタグを付ける
- 交点をワークシートに出力する

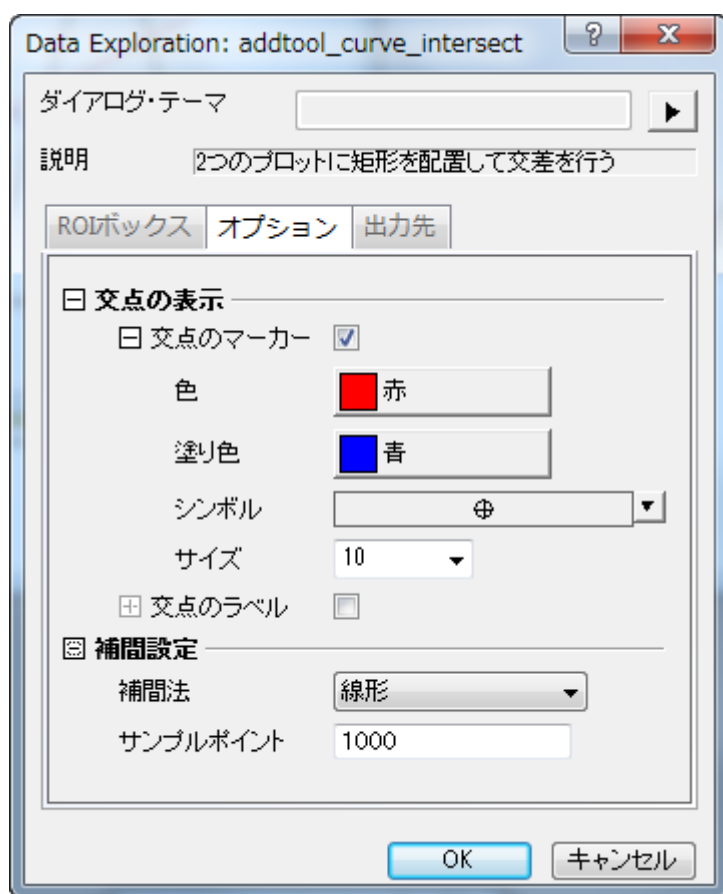
ステップ

このチュートリアルは、チュートリアルデータプロジェクト(<Origin EXE フォルダ>\Samples\TutorialData.opj)と関連しています。

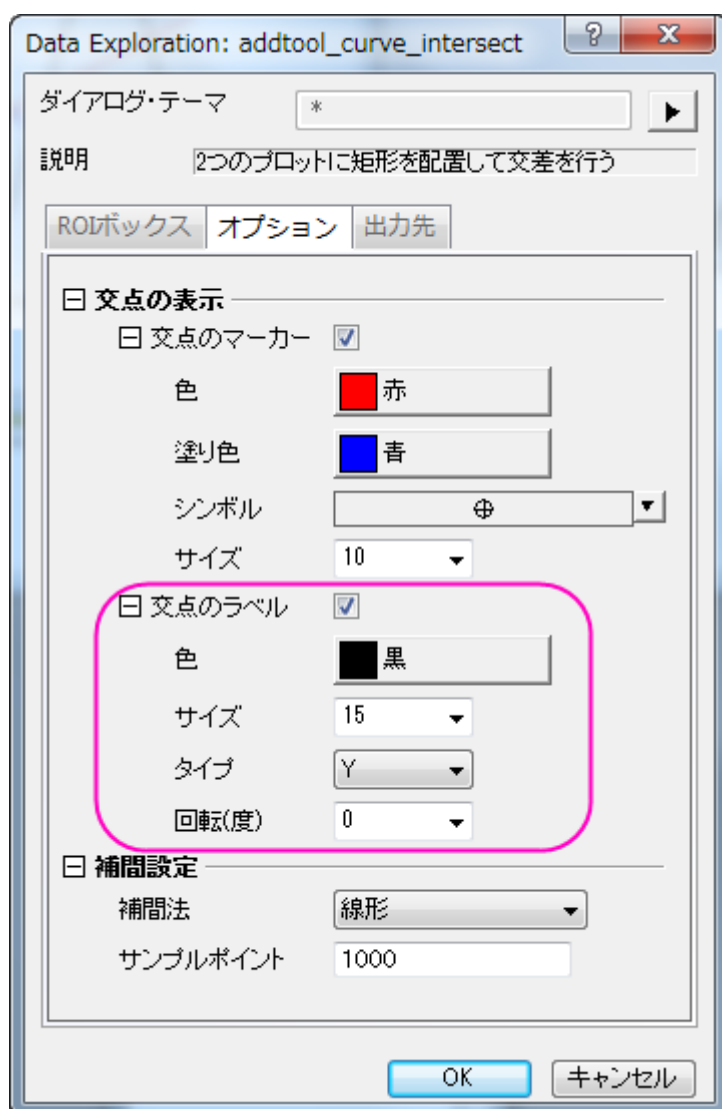
1. TutorialData.opj を開き、プロジェクトエクスプローラで Curve Intersection Gadget フォルダを開きます。
2. ワークブックの Book6 を開き、列 A から列 D を選択します。それから作図:線図:折れ線で折れ線グラフを作図します。



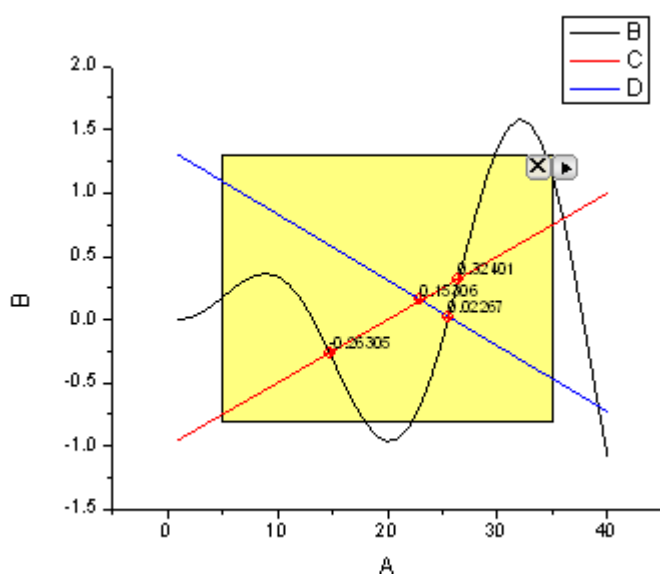
3. メインメニューからガジェット:交差を選択し、ダイアログボックスを開きます。オプションタブを開きます。




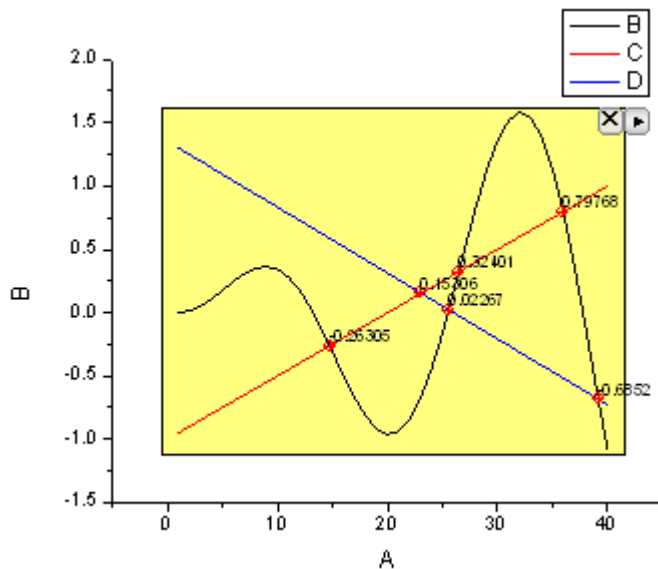
4. オプションタブから交点のラベルのチェックを付け、サイズを 15、タイプを Y、回転(度)を 0 とします。




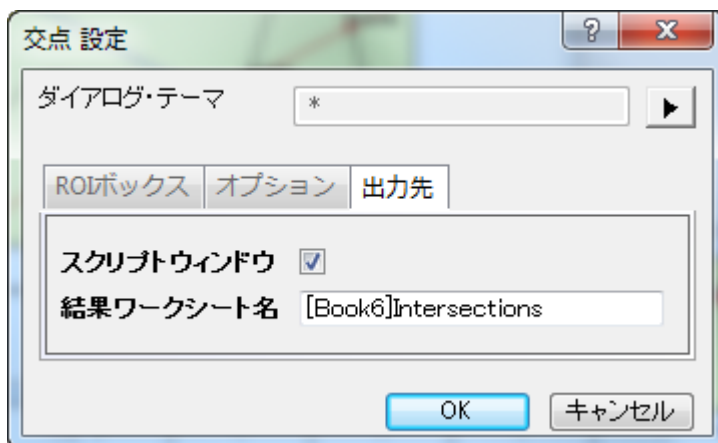
5. **OK** ボタンをクリックして、グラフウィンドウに戻ります。黄色い ROI ボックスがグラフに追加されます。





6. ROI ボックスの右上にある矢印ボタン  をクリックし、コンテキストメニューから **プロット群の最大範囲に拡大する** を選びます。下の図のように、ROI ボックスが全作図領域に広がります。



7. ROI ボックスの右上にある矢印 ボタン  をクリックします。コンテキストメニューから **設定...** を選択し、**交差設定** ダイアログを開きます。出力先のタブを開き、**結果ワークシート名** に [Book6]Intersections を入力します。



8. **OK** ボタンをクリックして、グラフウィンドウに戻ります。ROI ボックスの右上にある矢印ボタン  をクリックし、コンテキストメニューから **新しい出力** を選びます。
9. 結果は、**スクリプトウィンドウ** に出力されます。もう一度、矢印ボタン  をクリックしてメニューから **レポートシート** に行くを選びます。交点の X と Y の座標が結果のワークシートにリストされます。

	A(X)	B(Y)	C	D
ロングネーム	交点X	交点Y	曲線	交差法
1	14.73898	-0.26305	Book6_B vs. Book6_C	線形
2	26.4802	0.32401		
3	35.95356	0.79768		
4	25.56476	0.02267	Book6_B vs. Book6_D	
5	39.1559	-0.6852		
6	23.06123	0.15306	Book6_C vs. Book6_D	
7				
8				



4.1.4. 立ち上がり時間パネルツール

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 立ち上がり時間を分析](#)
- [4 下降時間を分析](#)

サマリー


立ち上がり時間ガジェットは、グラフ内のステップ状の信号の上昇または下降の時間を分析するのに使用できます。このガジェットは、四角形オブジェクトで直感的にグラフの領域を選択し、その領域の上昇または下降の時間を計算できます。

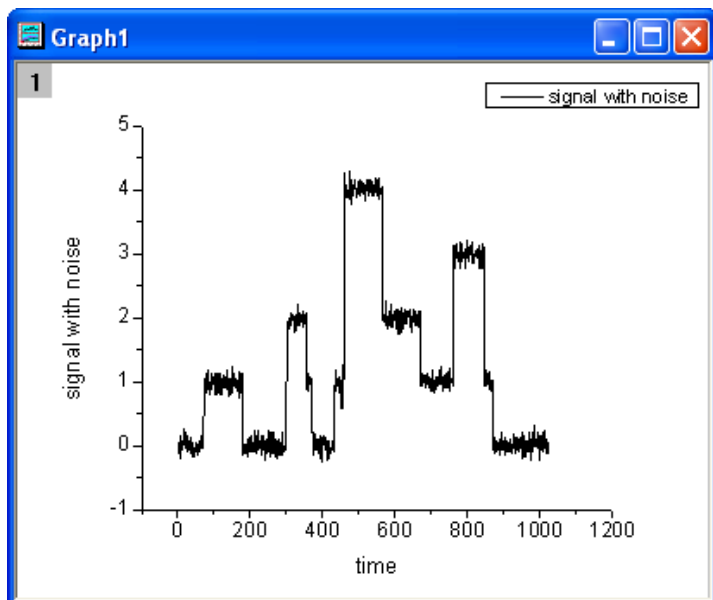
必要な Origin のバージョン: Pro 2015 SR0

学習する項目

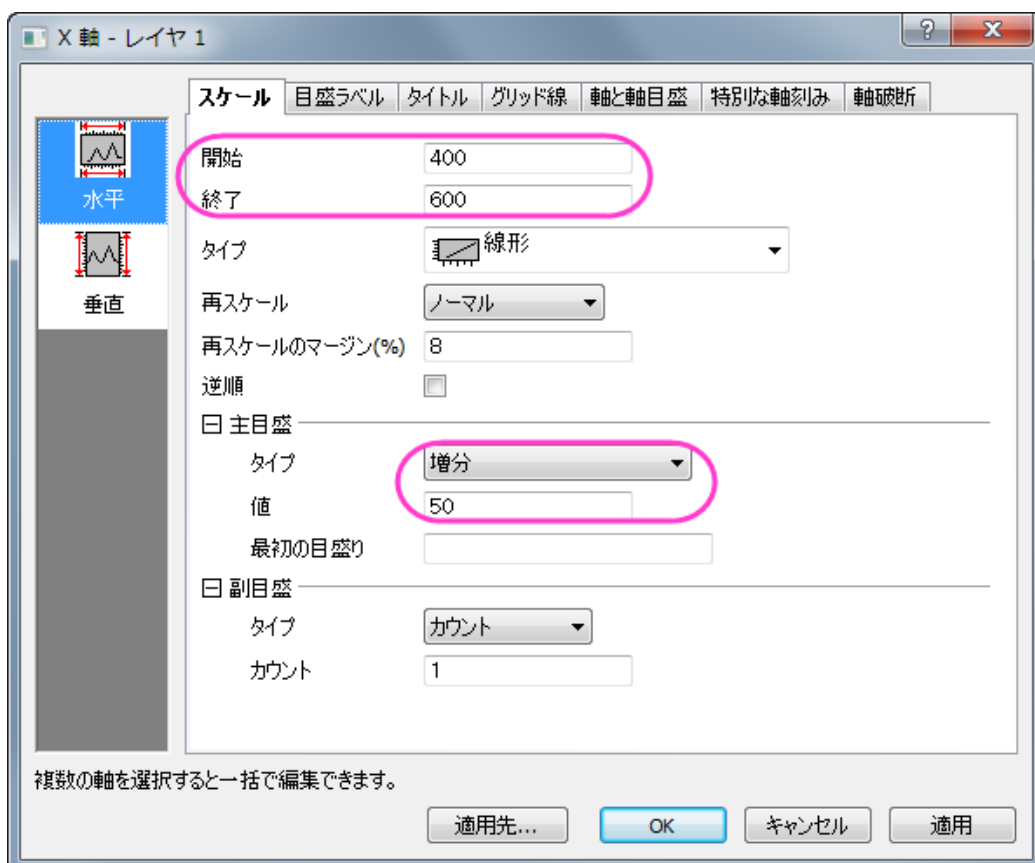
- シグナルの特定の領域を ROI ボックスの移動とサイズ変更で選択する
- グラフ内で立ち上がり時間(下降時間)と立ち上がり範囲(下降範囲)の印をつける
- 立ち上がり時間と下降時間でツールを切り替える
- 立ち上がり時間(下降時間)の結果を出力する

立ち上がり時間分析

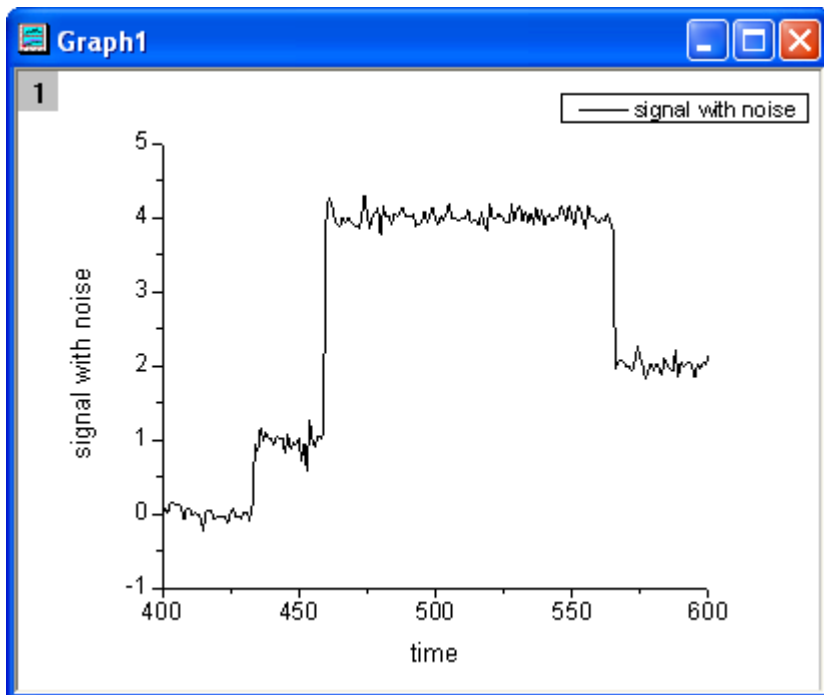
1. 新しいワークブックを作成し、 ボタンをクリックして、<Origin インストールフォルダ>\Samples\Signal Processing にある **Signal with High Frequency Noise.dat** をインポートします。
2. 列 B を選択し、メニューから **作図: 線図: 折れ線** を選択して、グラフを作成します。



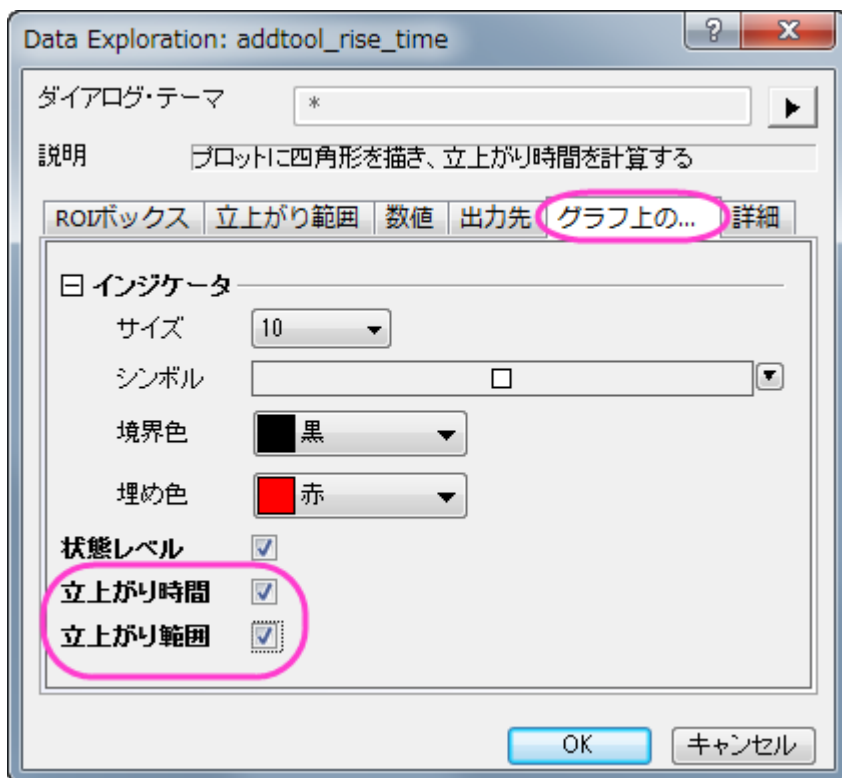
3. X 軸をダブルクリックして、**X 軸** ダイアログボックスを開きます。スケールタブを開き、主目盛の軸範囲を下図のように設定します。



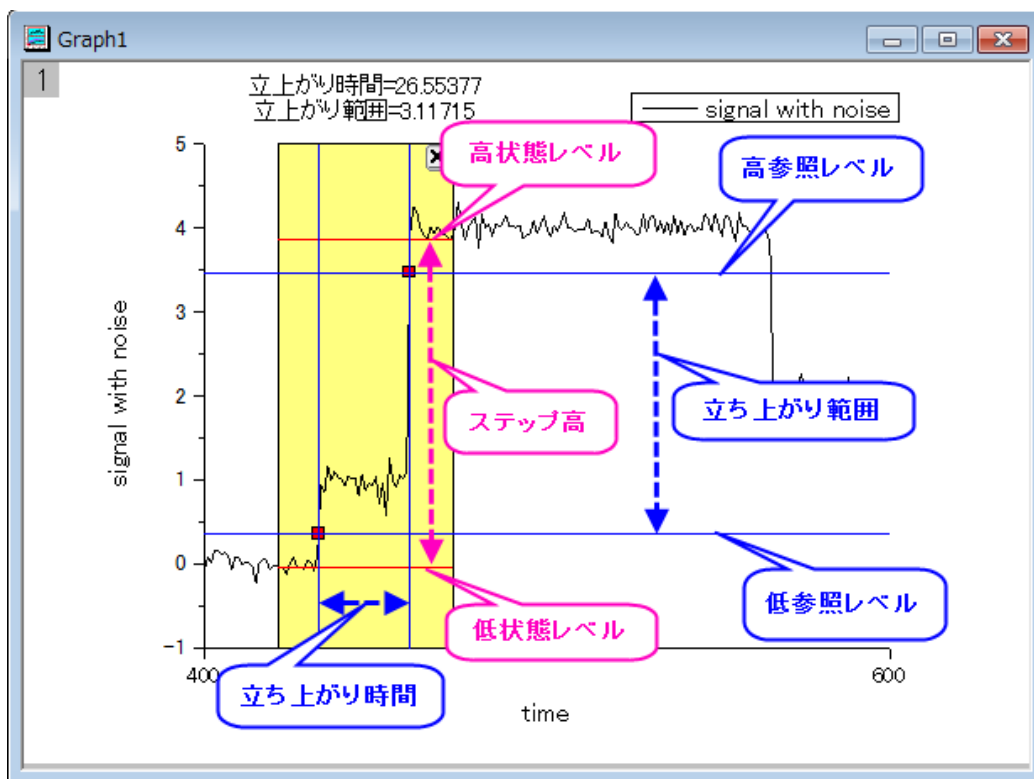
4. OK ボタンをクリックすると、グラフは以下のように更新されます。



5. Origin メニューから **ガジェット: 立ち上がり時間 ROI ツール** を選択し、**Data Exploration: addtool_rise_time** ダイアログボックスを開きます。グラフ上の表示タブを開き、**立ち上がり時間** と **立ち上がり範囲** のチェックを付けます。



6. **OK** ボタンをクリックすると、黄色い四角形がグラフに追加されます。四角形の ROI ボックスを水平に移動して立ち上がりシグナルステップの範囲に合わせます。



グラフ内では、**立ち上がり時間**と**立ち上がり範囲**が四角形の上部に表示されている事を確認してください。

2本の青い垂線が**立ち上がり時間**を表していて目印を通過しています。

2本の青い水平線は**低参照レベル**と**高参照レベル**を表し、2つの目印を通過するのは**立ち上がり範囲**として認識されます。

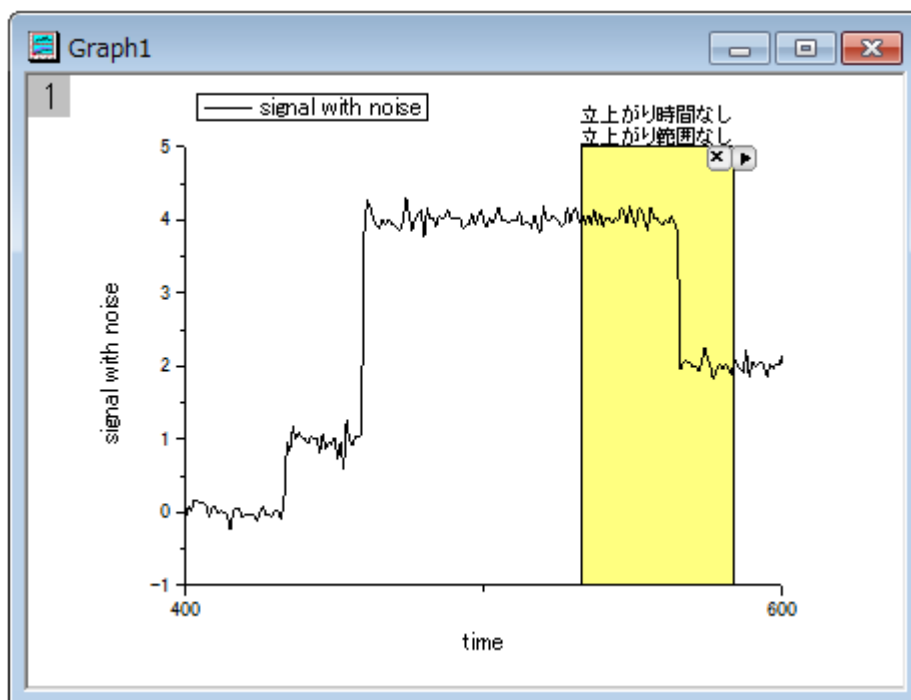
2本の赤い水平線は**低状態レベル**と**高状態レベル**を表しています。


7. 四角形の右上付近にある三角形▶ ボタンをクリックします。コンテキストメニューから**新しい出力**を選択します。結果は、**スクリプトウィンドウ**に出力されます。

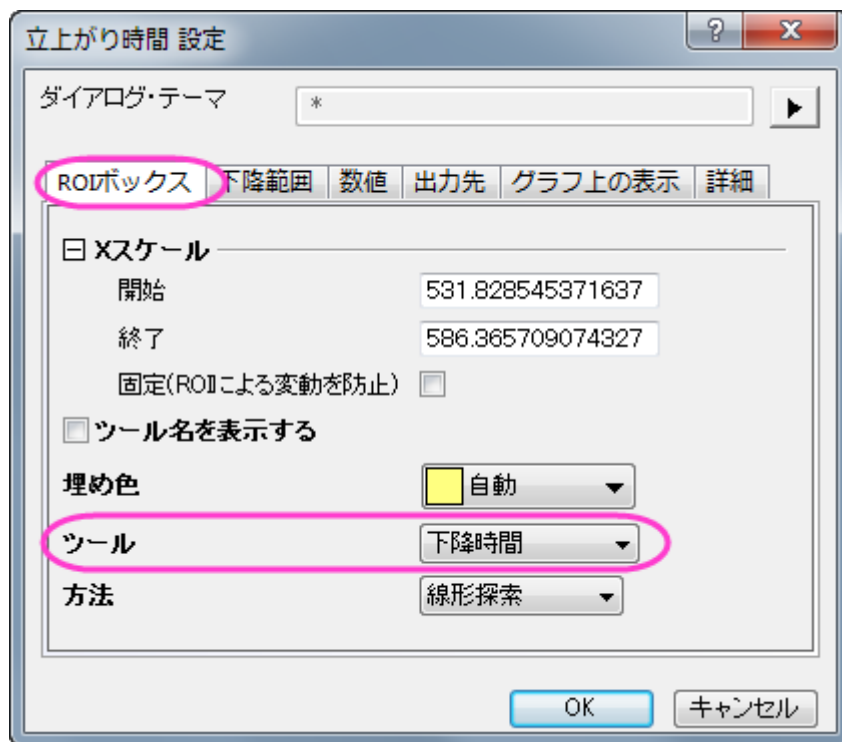


下降時間の分析

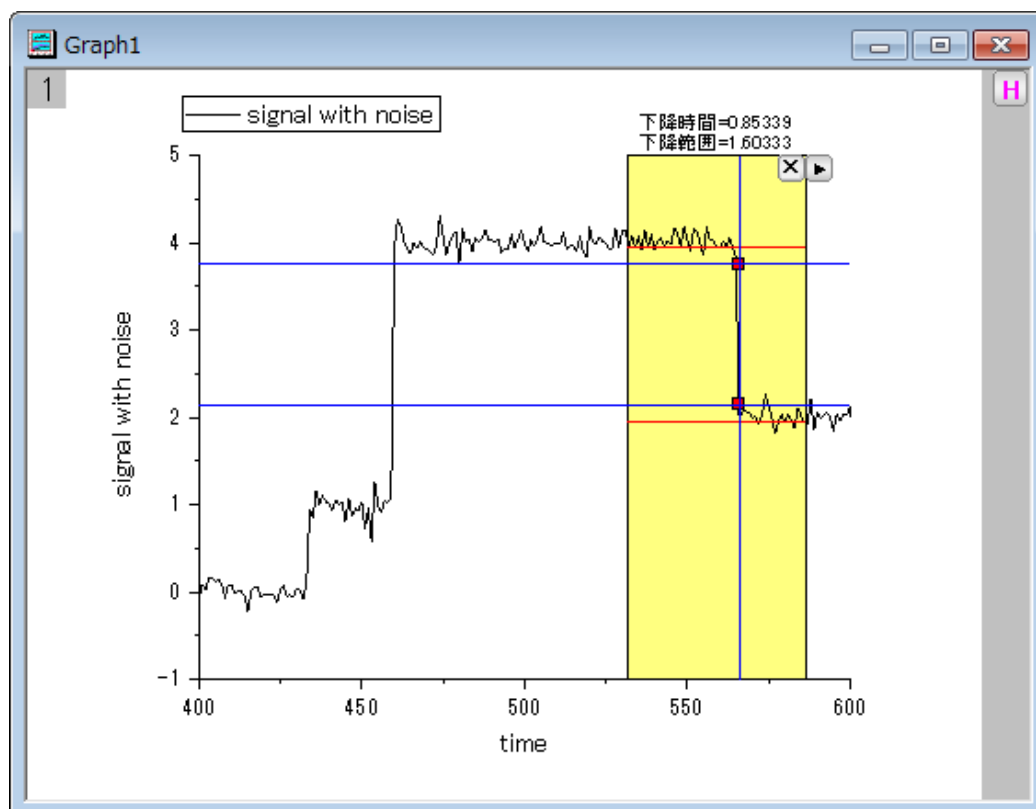
1. このガジェットは、同じように下降時間と下降範囲を求める事もできます。ROI の四角形を水平移動させて下降信号を確認します。




2. もう一度三角形ボタン  をクリックし、メニューから設定...を選択して立上がり時間設定ダイアログを表示します。ROI ボックスタブを開き、ツールドロップダウンリストから下降時間を選びます。



3. **OK** ボタンをクリックすると**下降時間**と**下降範囲**の数値が四角形の上部に表示されます。



4. 三角形ボタン  をクリックし、**新しい出力**を選択します。結果は、**スクリプトウィンドウ**に出力されます。



4.1.5. 補間ガジェット

サマリー

Origin はグラフがアクティブなときに補間ガジェットを使用すると ROI(関心のある範囲)ボックスの範囲内で簡単な補間を実行します。ROI ボックスを移動すると、補間する範囲を簡単に変更できます。

学習する項目

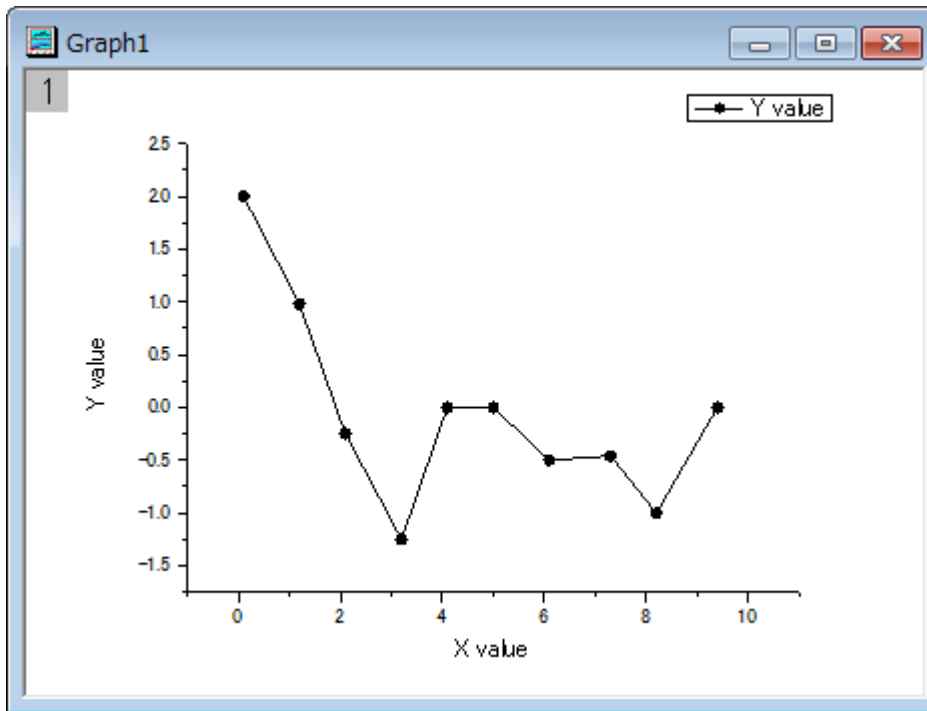
- ROI ボックス内のデータポイントを簡単に補完する
- 既知の X 値から Y の補間データを簡単に検索する
- 補間値をスクリプトウィンドウや**結果ログ**、特定のワークシートに出力する

ステップ

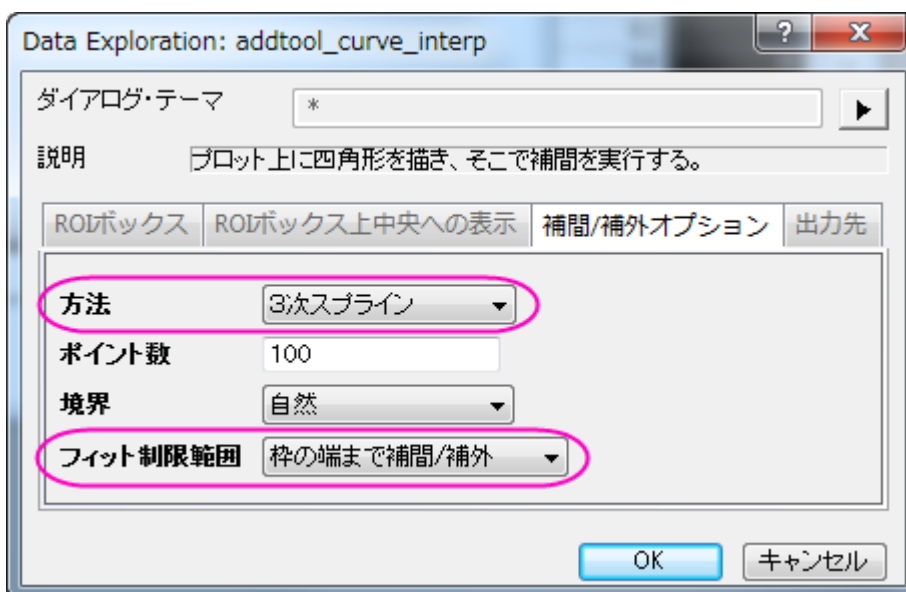
このチュートリアルは、チュートリアルデータプロジェクト(<Origin EXE フォルダ>\Samples\TutorialData.opj)と関連しています。

1. TutorialData.opj を開き、プロジェクトエクスプローラで **Interpolate Gadget** フォルダを開きます。

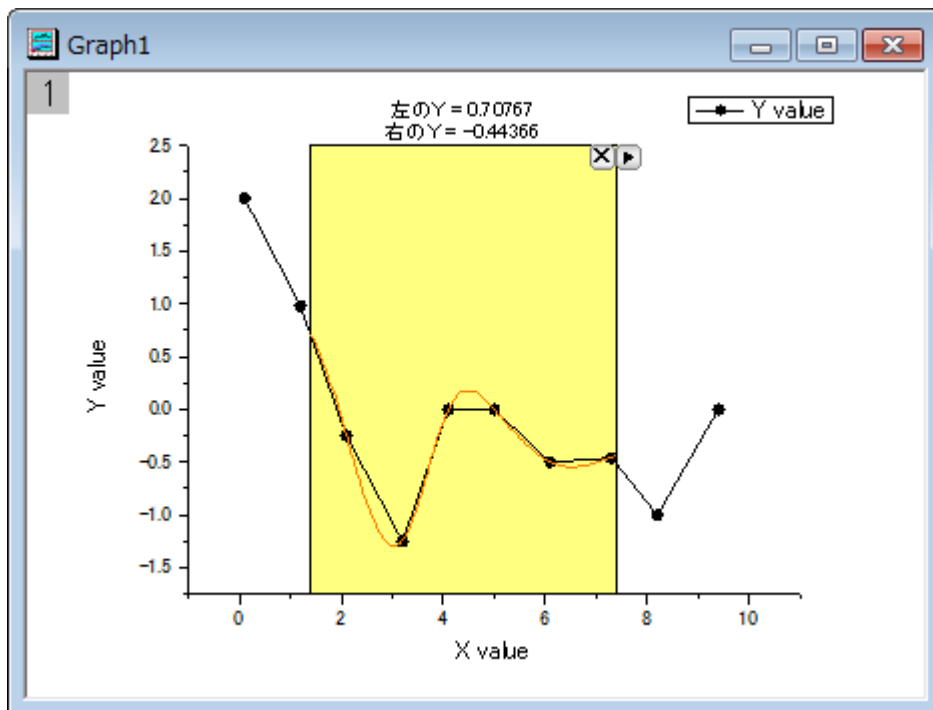
2. ワークブック Book1R で列 A と列 B を選択し、線+シンボルグラフを作図します。




3. グラフをアクティブにしてから、Origin メニューでガジェット:補間を選び、Interpolate: addtool_curve_intep ダイアログを開きます。
4. 補間/補外オプションのタブに行きます。方法では 3 次スプラインを選択し、フィット制限範囲では枠の端まで補間/補外を選択します。

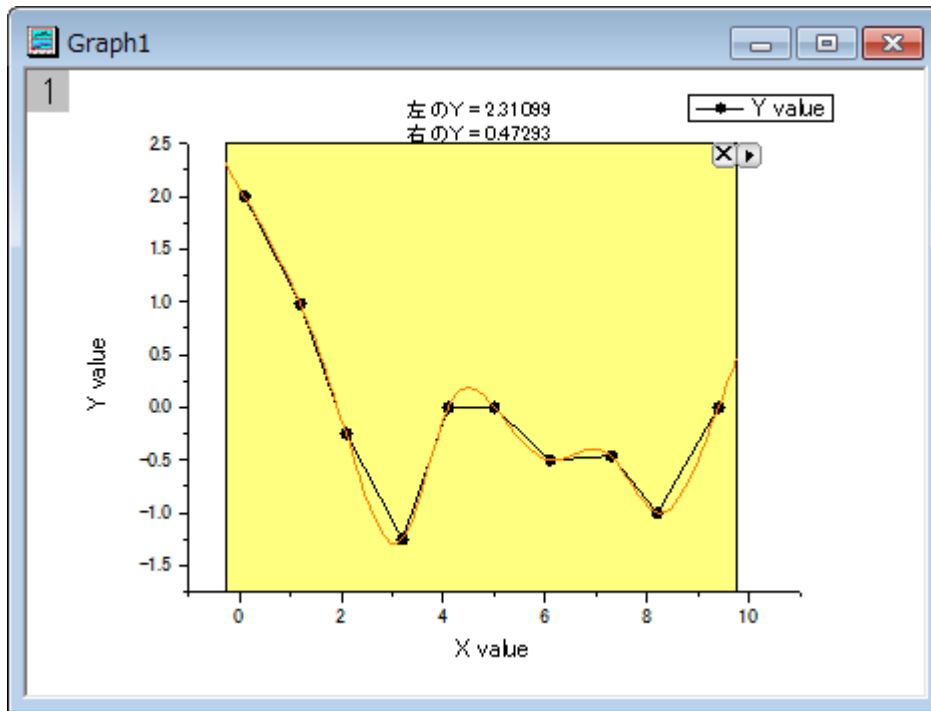


5. OK ボタンをクリックします。すると、グラフに補間曲線が追加されます。補間線の両端の y 値は四角形の上に表示されます。



6. データ範囲は黄色い ROI ボックスを移動およびサイズ変更で簡単に変更でき、補間曲線は ROI ボックスを移動するごとに更新されます。

三角形ボタン  をクリックし、プロット群の最大範囲に拡大するをフライアウトメニューから選択し、曲線全体を補間します。



7. このガジェットは特定の x 値から y 値の補間値を出力することもできます。**X/Y の補間**をフライアウトメニューから選択し、**X から Y を補間**ダイアログを表示します。複数の x 値を入力して**補間**ボタンをクリックします。このツールで x 値から補間された y 値を出力します。

8. 補間された y 値は**スクリプトウィンドウ**、**結果ログ**、特定のワークシートのいずれかに出力できます。



4.1.6. クラスターガジェット

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 基本統計を実施する](#)
- [4 クラスター内にあるポイントを除外する](#)
- [5 ROI 範囲外の統計結果を入手する](#)
- [6 異なる範囲のポイントに色を付ける](#)

サマリー

Origin はグラフ内の「関心のある範囲」(Region of interest, ROI)で簡単な統計を行う、クラスターガジェットをサポートしています。このガジェットではデータポイントの編集、消去、マスクができます。ROI オブジェクトを移動したり大きさを変えると、統計結果が更新されます。

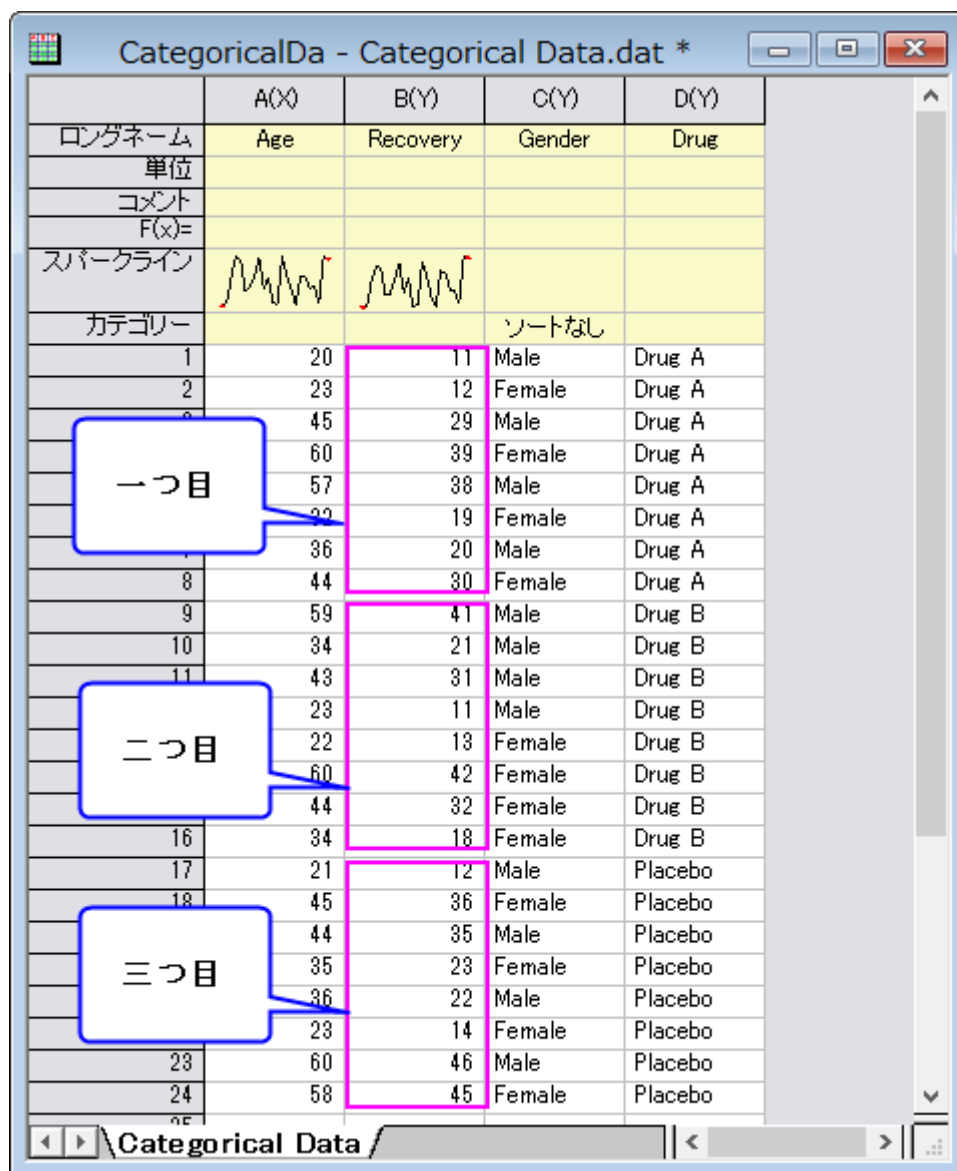
必要な Origin のバージョン: Origin 2016 SR0 以降 (Pro 版のみ)

学習する項目

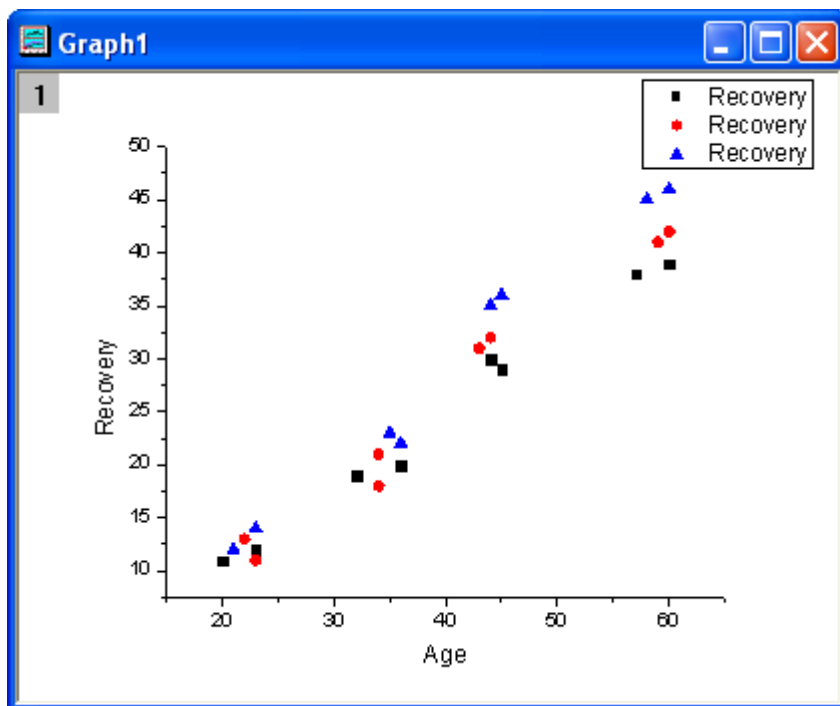
- 「関心のある範囲」(Region of interest, ROI)で簡単な統計を行う方法
- データポイントの編集、例えば消去のやり方や、グラフ内の点をメニューやボタンを使ってマスクする方法
- ROI 範囲の中または外のポイントを使って統計的な出力をする方法
- 分類されたデータにより、データを分類しカラーマップする方法

基本統計を実施する

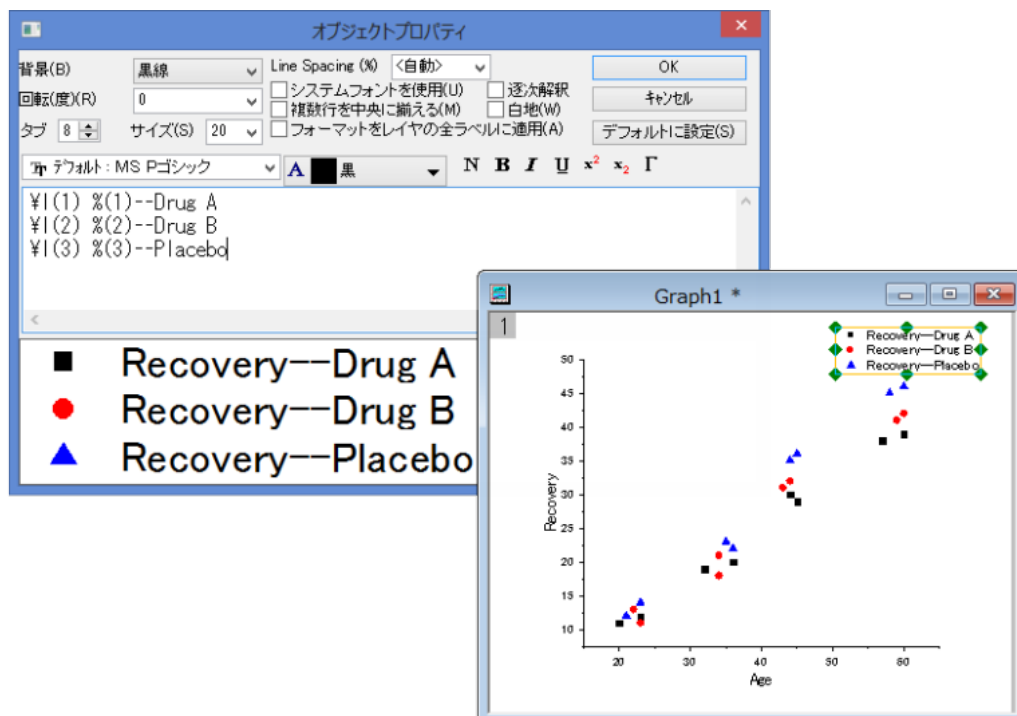
1. 新規ワークブックを開始して、<Origin プログラムフォルダ>\Samples\Graphing にある Origin のサンプルデータ、*Categorical Data.dat* をインポートします。
列 D を選択して右クリックし、ショートカットメニューから **ソート(ワークシート):昇順** を選択します。ワークシートが *Drug* のカテゴリでソートされたことが分かります。
2. **Ctrl** キーを押しながら列 B の 3 か所を別々に選択します。



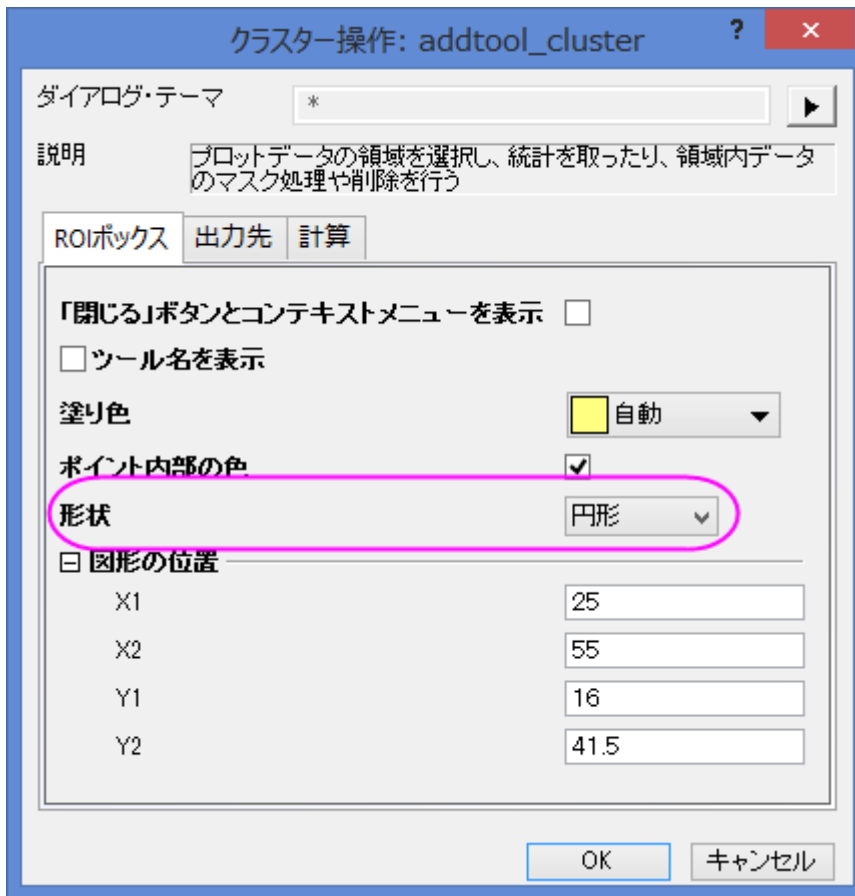
- メニューから作図:基本の 2D グラフ:散佈図を選択して、グラフを作成します。それぞれの薬による回復率を示した 3 つのプロットが表示されます。



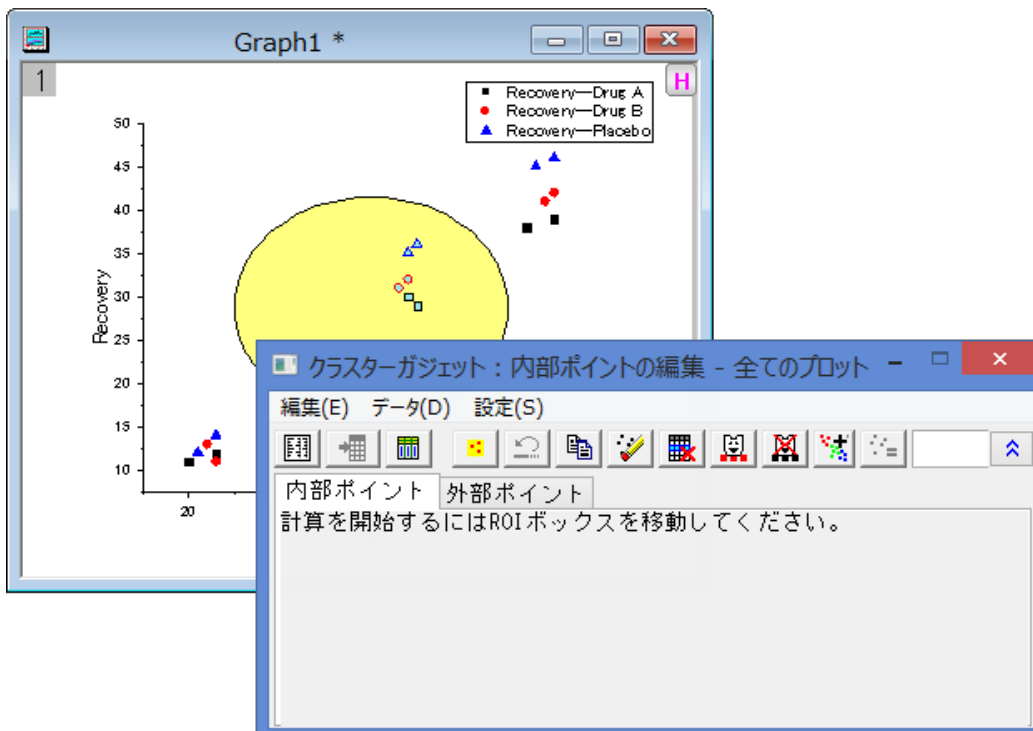
4. グラフの凡例を右クリックしてプロパティを選んでオブジェクトプロパティダイアログを開きます。次の図のように凡例を編集します。OK ボタンをクリックします。



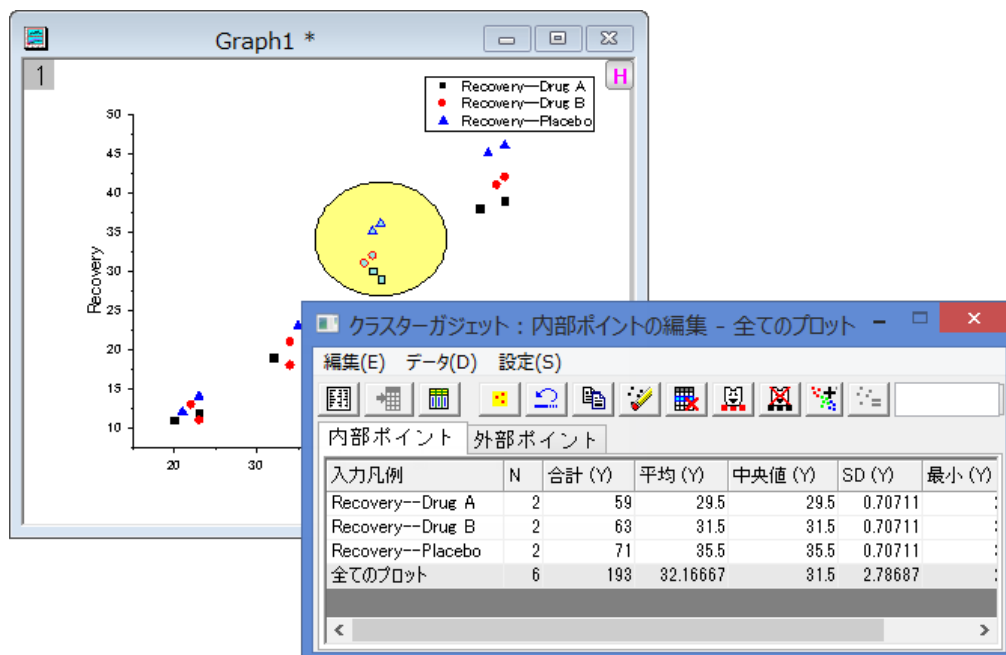
5. メニューからガジェット: クラスター操作を選び、クラスター操作: addtool_cluster ダイアログを開きます。ROI ボックスにある、形状のドロップダウンリストから円形を選びます。





6. **OK** ボタンをクリックします。**OK** をクリックすると、グラフ上に **ROI** として黄色の円が追加され、**クラスタガジェット** ダイアログが開きます。



7. 統計情報が欲しい範囲に黄色い円を移動すると、内部ポイントタブに情報が表示されます。




8. 統計レポートを出力ボタン  をクリックします。ボタンを押すと、結果ログ、スクリプトウィンドウ、クラスターワークブックを出力します。
9. レポートシートに行くボタン  をクリックすると、クラスターワークブックを表示します。

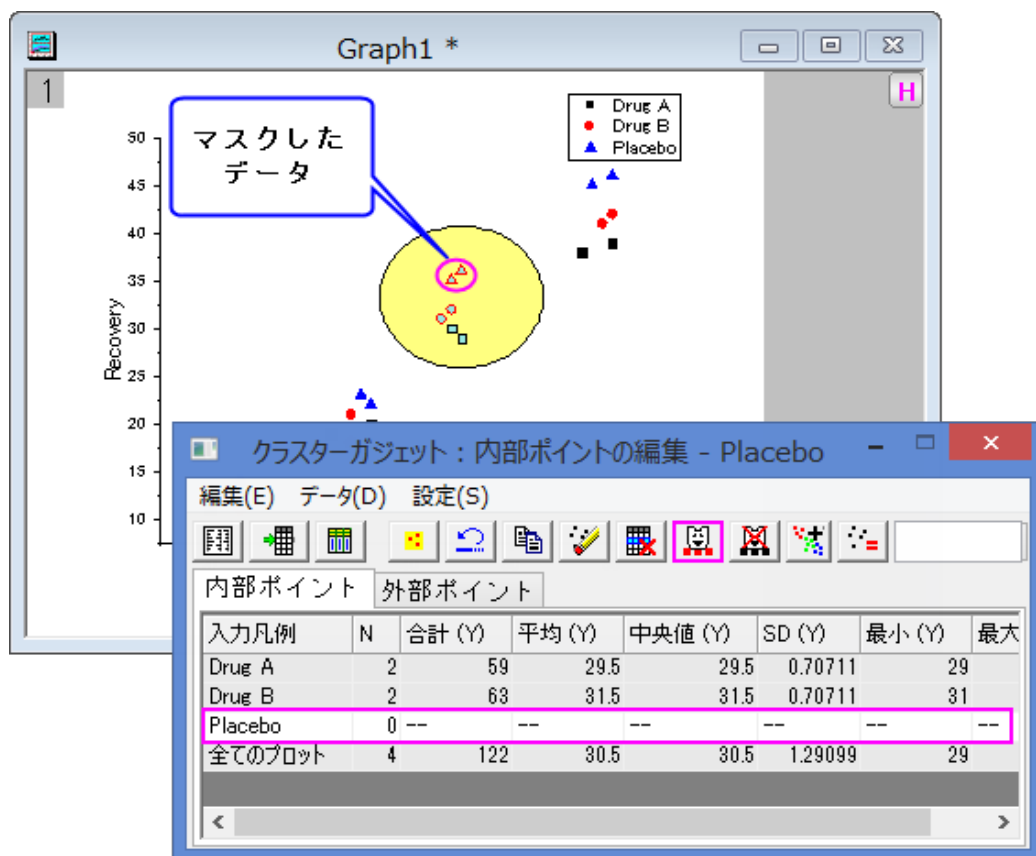
	A	B	C(Y)	D(Y)	E(Y)	F(Y)	G ^
ロングネーム	Region	データ	N	合計 (Y)	平均 (Y)	中央値 (Y)	
F(x)=							
1	内部ポイント	Recovery--Drug A	2	59	29.5	29.5	
2	内部ポイント	Recovery--Drug B	2	63	31.5	31.5	
3	内部ポイント	Recovery--Placebo	2	71	35.5	35.5	
4	内部ポイント	全てのプロット	6	193	32.16667	31.5	
5							


クラスター内にあるポイントを除外する

このセクションでは、テーマを使って、グラフをカスタマイズする方法を説明します。上記例を元に *Recovery of Placebo* のデータを除外した *Recovery of DrugA* と *Recovery of DrugB* の簡単な統計を算出します。

1. クラスターガジェットダイアログのデータメニューをクリックし、Plot(1)とPlot(2)のチェックを外します。下のパネルで1行目と2行目はグレーになり、ダイアログ内のボタンで操作できなくなります。

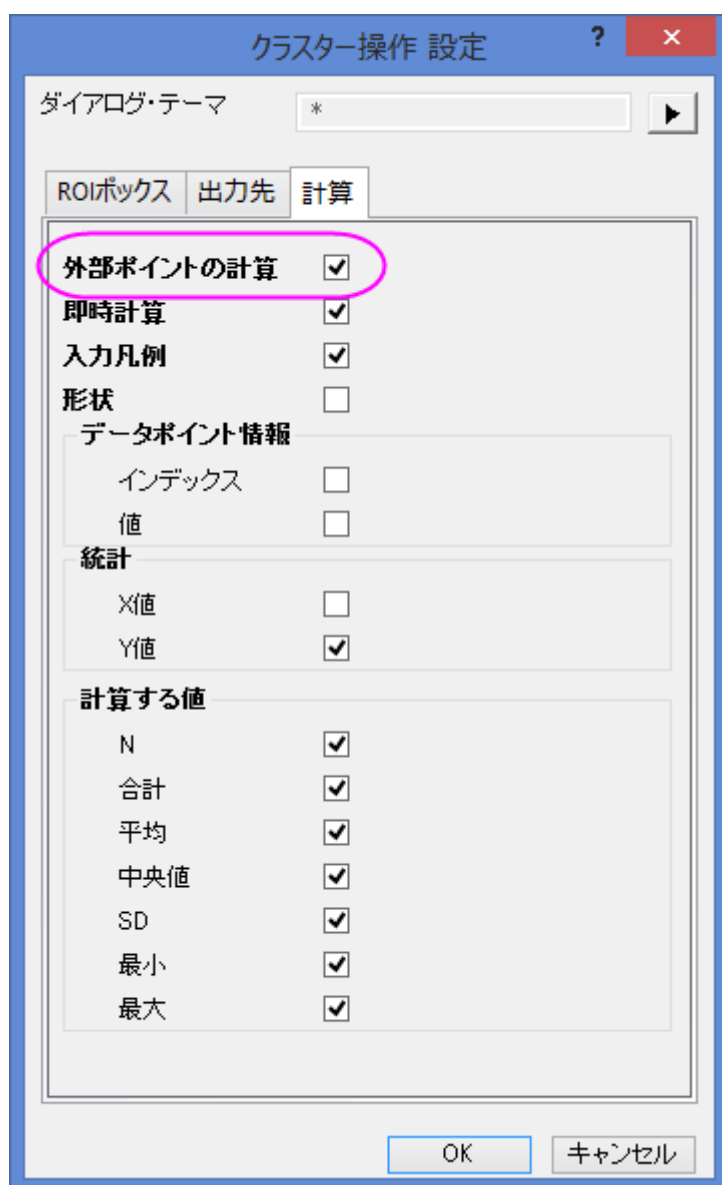
2. **データポイントのマスク** ボタン  をクリックします。Recovery of Placebo のデータポイントがマスクされ、データポイントの色が赤くなります。同時に、Recovery of Placebo 統計の数値が欠損値になります。



3. **統計レポートを出力** ボタン  をクリックします。ボタンを押すと、結果ログ、スクリプトウィンドウ、クラスタワークブックを出力します。

ROI 範囲外の統計結果を入手する

- クラスタージャケットダイアログのメニューで**設定: 設定**と選択し、**クラスタ操作設定**ダイアログを開きます。
- 計算**タブを開きます。**外部ポイント**を計算にチェックを付けます。




3. OK ボタンを押すと ROI ボックスの外側の統計結果を外部ポイントタブ内に表示します。

クラスタージャケット：内部ポイントの編集 - Recover...

編集(E) データ(D) 設定(S)

内部ポイント 外部ポイント

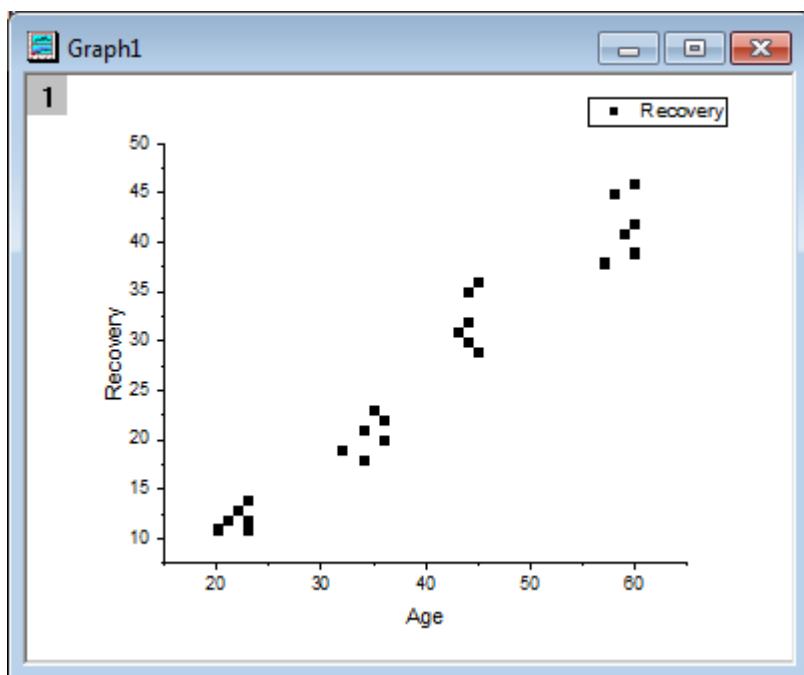
入力凡例	N	合計 (Y)	平均 (Y)	中央値 (Y)	SD (Y)	最小 (Y)
Recovery--Drug A	6	139	23.16667	19.5	12.41639	
Recovery--DrugB	6	146	24.33333	19.5	13.76469	
Recovery--Placebo	6	162	27	22.5	14.96663	
全てのプロット	18	447	24.83333	20.5	13.02599	

4. **統計レポートを出力**ボタンをクリックします。内部と外部ポイントの結果は、結果ログ、スクリプトウィンドウ、クラスターワークブックに表示されます。

異なる範囲のポイントに色を付ける

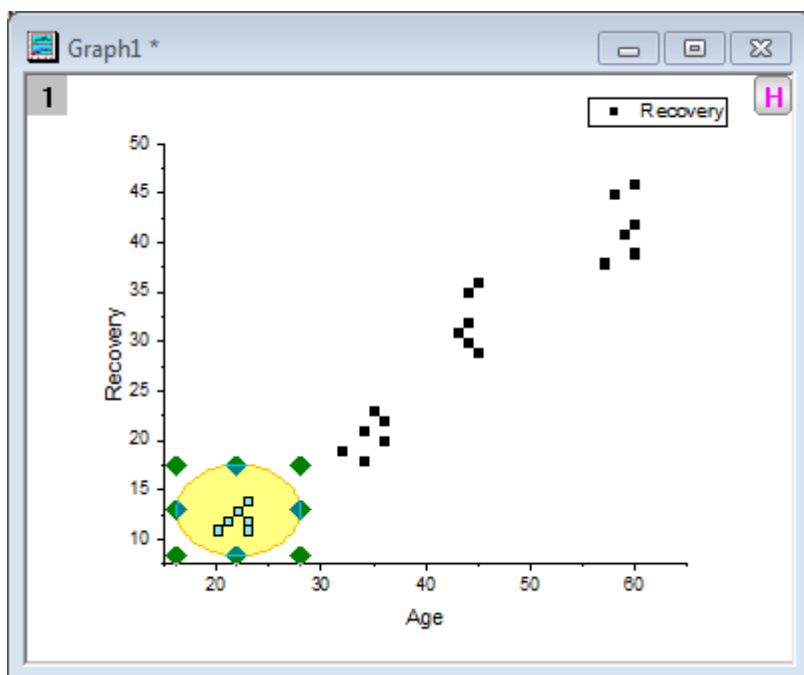
グラフから直接データを分類し、元のワークシートの Categorical group column に出力することが出来ます。また、Categorical group column にシンボルキャラクターのマップも出力することができます。


新規ワークブックを作成し、<Origin Program Folder>\Samples\Graphing\Categorical Data.dat.を再インポートします。列 B を選択し、散布図をプロットします。



4つのグループにポイントはクラスター化されています。クラスターガジェットの**カテゴリ**を作成を使って、この列のクラスターグループやシンボルカラーのマップから、**カテゴリ**列を作成します。

1. **ガジェット: クラスター操作**を選択し、**クラスター操作: addtool_cluster** ダイアログを開きます。ROI ボックスタブにある、**形状**のドロップダウンリストから**円形**を選びます。
OKをクリックすると、グラフ上に ROI として黄色の円を追加され、**クラスターガジェット**ダイアログが開きます。
2. 左下にある最初のデータ群だけが入るよう、ROI ボックスの円を動かして大きさを調整します。



クラスターガジェットのカテゴリを作成ボタン  をクリックして、**カテゴリ値作成** ダイアログを開きます。カテゴリグループ名に Group、カテゴリに 1 と入力します。続けて**カテゴリでデータを色付け** チェックボックスを選択します。

現在のROIにデータポイントのカテゴリを作成

カテゴリグループ名

カテゴリ

各データプロットをグループ列に追加

OK キャンセル

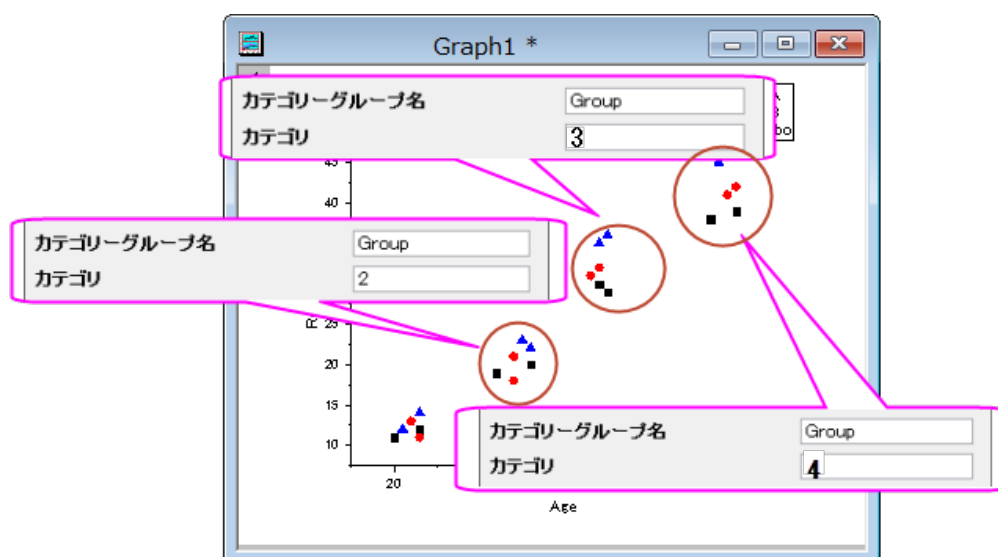
OK ボタンをクリックします。Group と名付けられた新しいカテゴリ列が元のデータシートに追加され、ROI 内のデータポイントはこの**(Group)列**の中の"1"にタグ付けされます。散布図ではこのカテゴリ列をカラーインデックスとして使用します。

CategoricalD1 - Categorical Data.dat *

	A(X)	B(Y)	E(Y)	C(Y)	D(Y)
ロングネーム	Age	Recovery	Group	Gender	Drug
単位					
コメント			Categories		
F(x)=					
スパークライン					
カテゴリー			ソートなし		
1	20	11	1	Male	Drug A
2	23	12	1	Female	Drug A
3	22	13	1	Female	Drug B
4	23	11	1	Male	Drug B
5	21	12	1	Male	Placebo
6	23	14	1	Female	Placebo
7	36	20	--	Male	Drug A
8	32	19	--	Female	Drug A
9	34	18	--	Female	Drug B
10	34	21	--	Male	Drug B
11	36	22	--	Male	Placebo



Categorical Data

3. 残りの 3 群にも同じステップを繰り返し、順に 2,3,4 とタグ付けします。



元のワークシートは次のようになります。

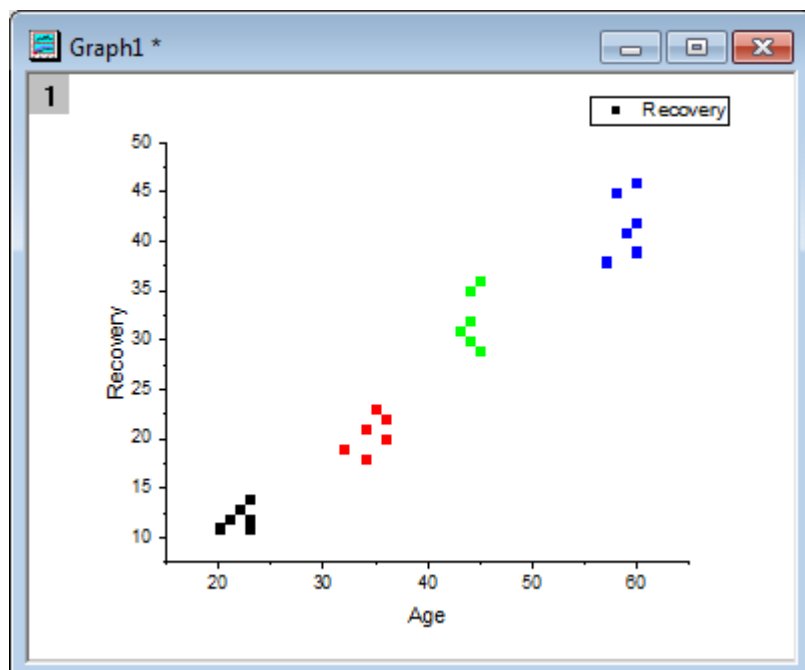
CategoricalDa - Categorical Data.dat *

	A(X)	B(Y)	E(Y)	C(Y)	D(Y)
Long Name	Age	Recovery	Group	Gender	Drug
Units					
Comments			Categories		
F(x)=					
Sparklines					
Categories			Unsorted		
6	23	14	1	Female	Placebo
7	36	20	2	Male	Drug A
8	32	19	2	Female	Drug A
9	34	18	2	Female	Drug B
10	34	21	2	Male	Drug B
11	36	22	2	Male	Placebo
12	35	23	2	Female	Placebo
13	45	29	3	Male	Drug A
14	44	30	3	Female	Drug A
15	44	32	3	Female	Drug B
16	43	31	3	Male	Drug B
17	44	35	3	Male	Placebo
18	45	36	3	Female	Placebo
19	57	38	4	Male	Drug A
20	60	39	4	Female	Drug A

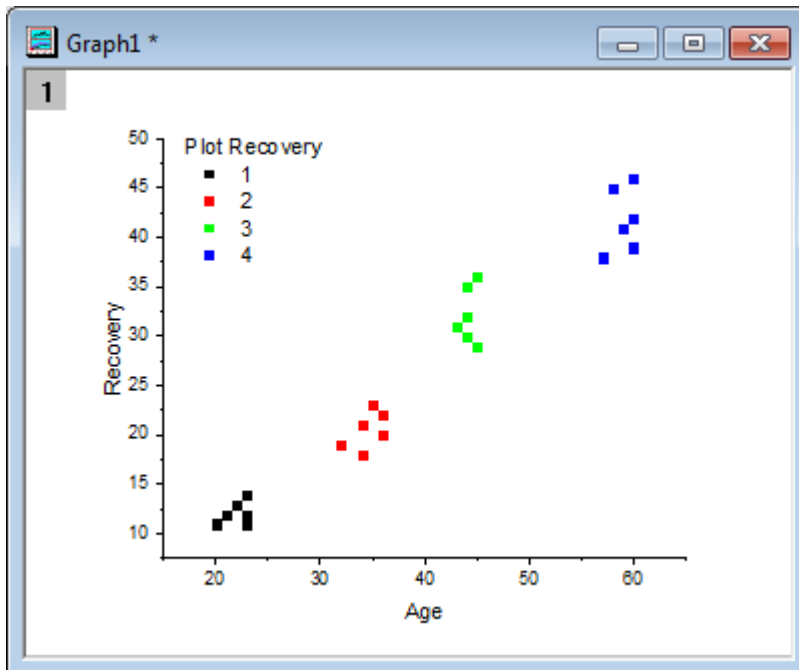
Categorical Data

クラスターガジェットを閉じます。

4. グラフは下図のようになります。



5. 凡例を削除します。グラフ操作: 凡例: カテゴリー値と選択し、カテゴリー値...legendcat ダイアログを開きます。全カテゴリーを表示チェックボックスのチェックを外します。OK をクリックします。新しい凡例付の散布図が次のようになります。



4.1.7. クイックフィットガジェット

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ステップ](#)
 - [3.1 線形フィット](#)
 - [3.2 非線形曲線フィット](#)

サマリー

クイックフィットガジェットを使用すると、ROI(Region of Interest) 範囲内のデータに対して、素早くカーブフィットを実行できます。

必要な Origin のバージョン: Origin 8.6 SR0 以降


学習する項目

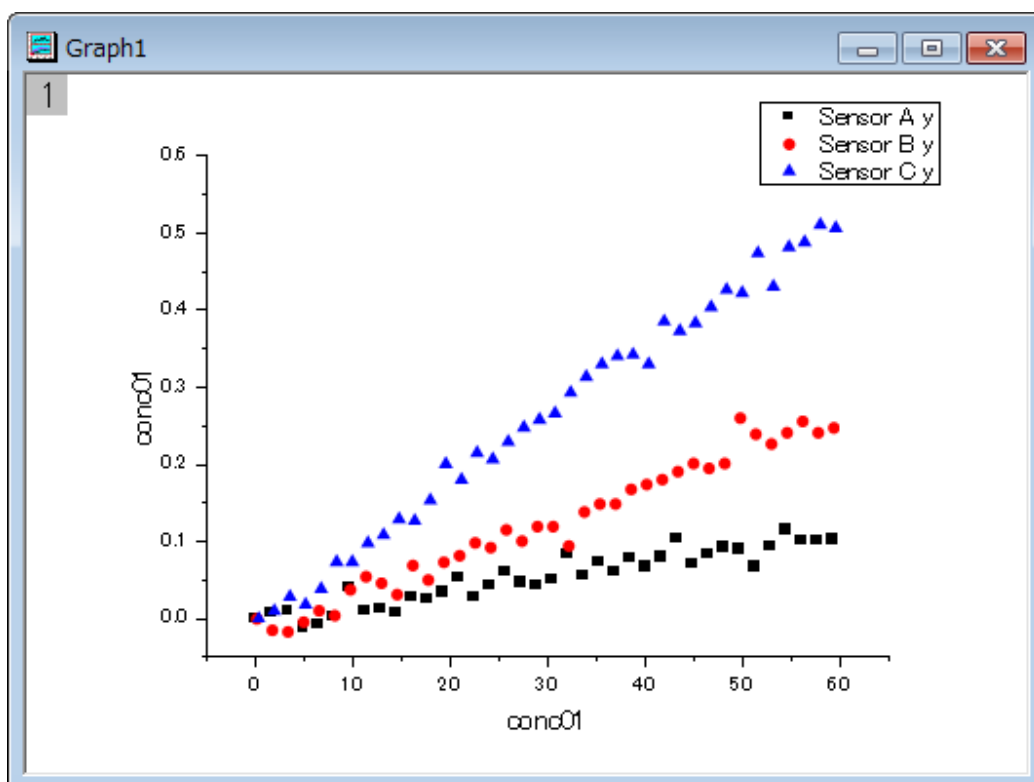
このチュートリアルでは、以下の項目について解説します。


- クイックフィットガジェットを使用して線形フィットを実行する
- クイックフィットガジェットを使用して非線形曲線フィットを実行する
- ダイアログテーマの保存と再利用

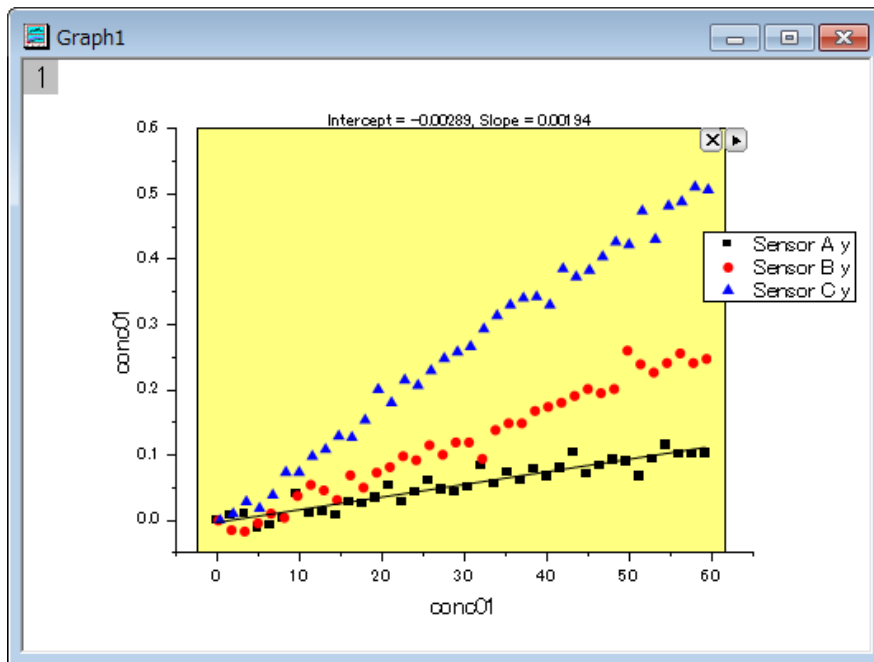
ステップ


線形フィット

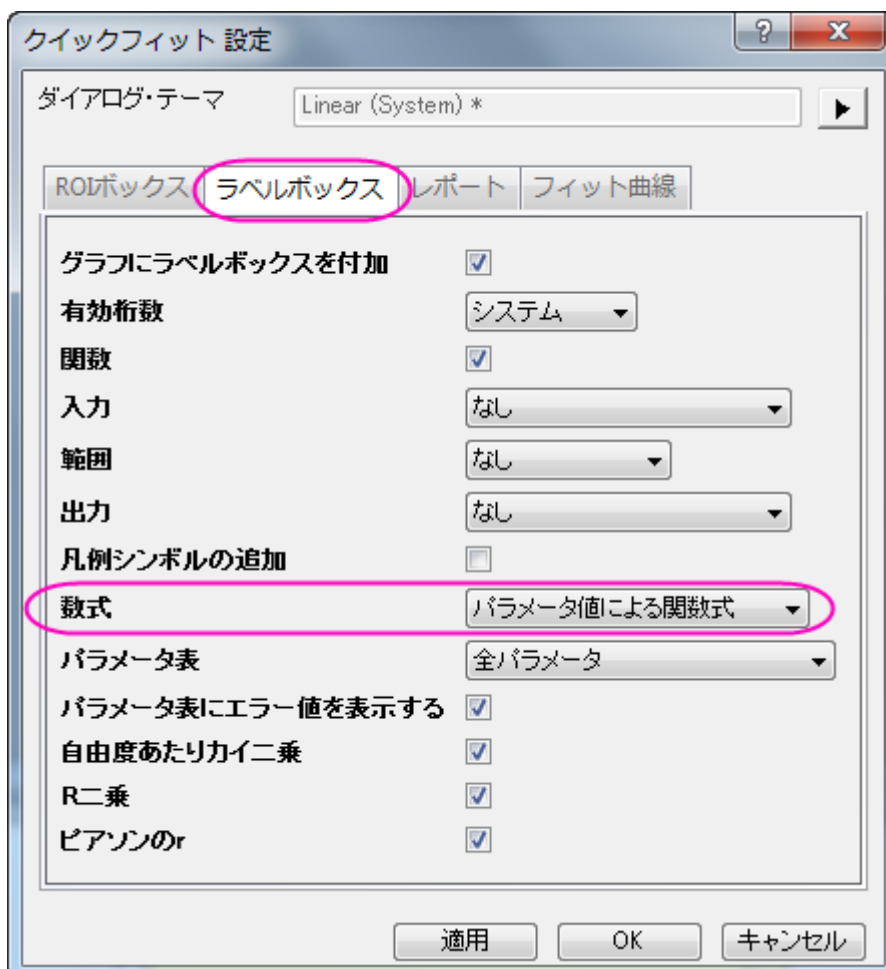
1. Origin を起動して、**ファイル:インポート:インポートウィザード**と操作します。データソースで<Origin Folder>/Samples/Curve Fitting のフォルダを参照し、**Step01.dat** ファイルを追加します。ファイルを指定すると、インポートフィルタとして**データフォルダ:step** が、自動的に選択されます。(現在のデータタイプのインポートフィルタの項目で確認できます) **完了** ボタンをクリックして、ファイルをインポートします。
2. A から F 列を選択して  ボタンをクリックし、散布図を作図します。



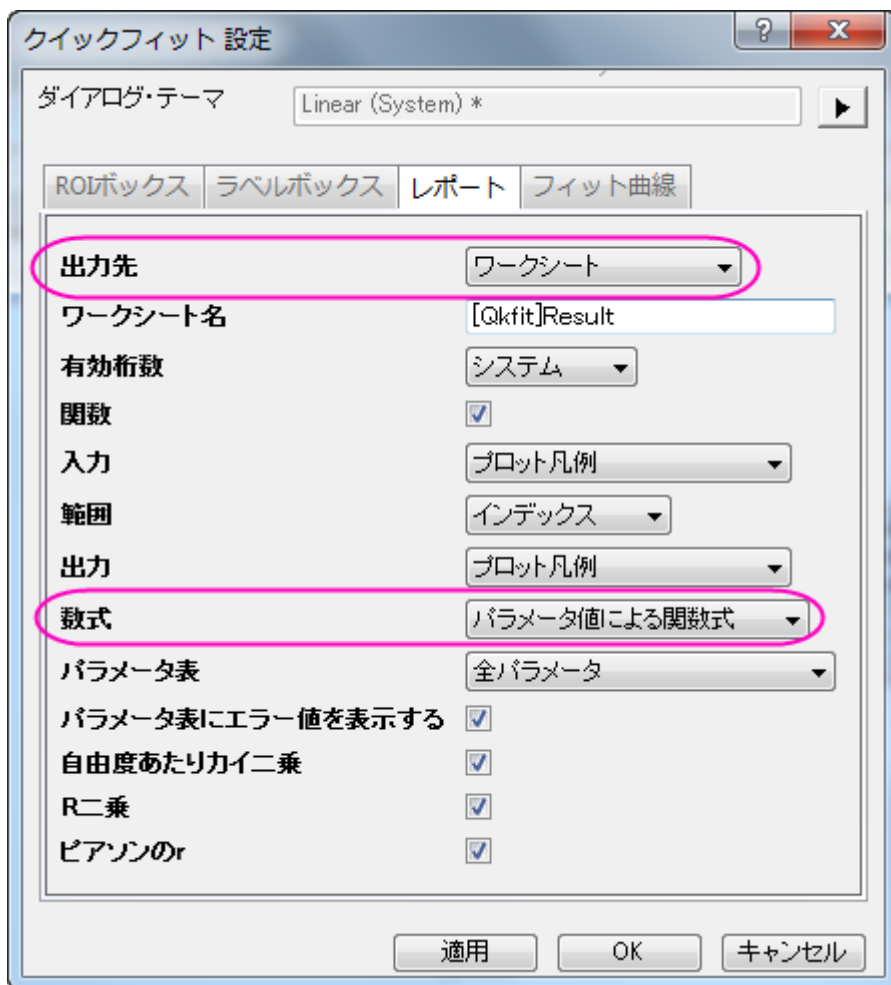
3. メインメニューの**ガジェット:クイックフィット:1 Linear(System)**を選択すると、ROI(Region of Interest)ボックスがグラフ内に表示されます。三角形ボタン  をクリックし、**プロット群の最大範囲に拡大する**をメニューから選択して、ROIボックスを最大範囲に拡大します。




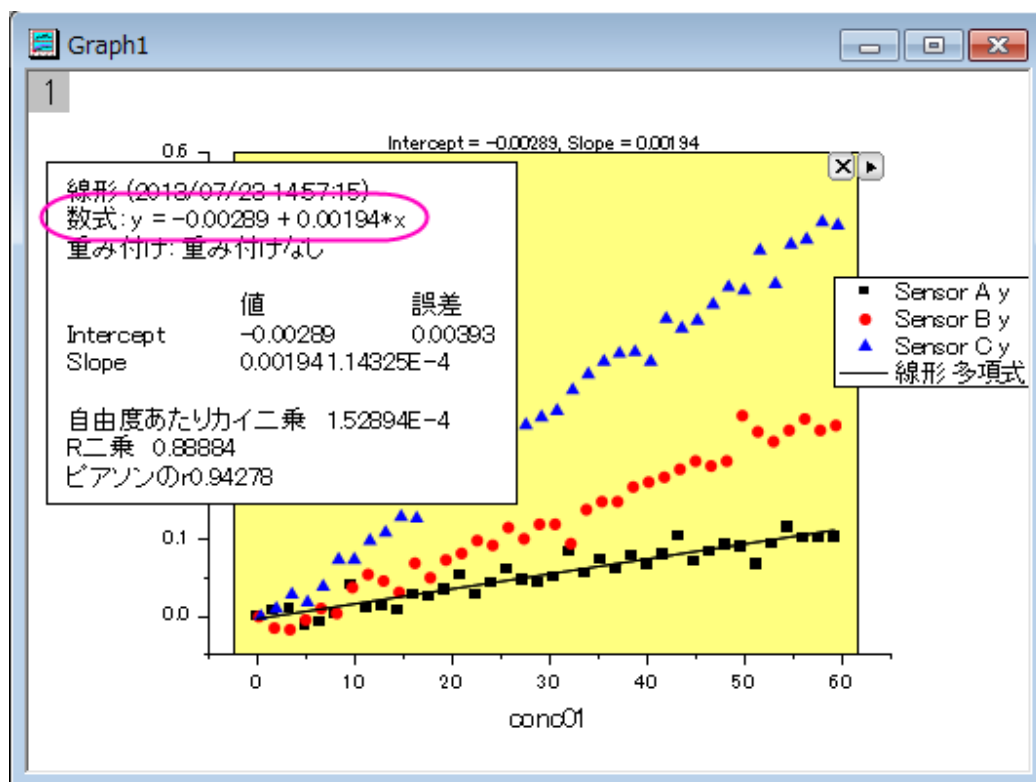
4. 三角形ボタン  をクリックして、メニューから **設定...** を選択します。クイックフィット設定ダイアログが開きます。このダイアログで、ラベルボックスタブを開き、数式のドロップダウンからパラメータ値による関数式を選択します。



5. レポートタブに切り替え、出力先ドロップダウンリストから **ワークシート** をし、**数式** をパラメータ値による関数にします。



6. **OK** ボタンをクリックして、ダイアログボックスを閉じます。三角形ボタン  をクリックして、メニューから**新しい出力** を選択します。すると、レポートワークシートでは Sensor 01 のフィットフィット結果が出力され、グラフウィンドウにはラベルボックスが追加されます。ラベルボックスにはフィット結果が入力されています。



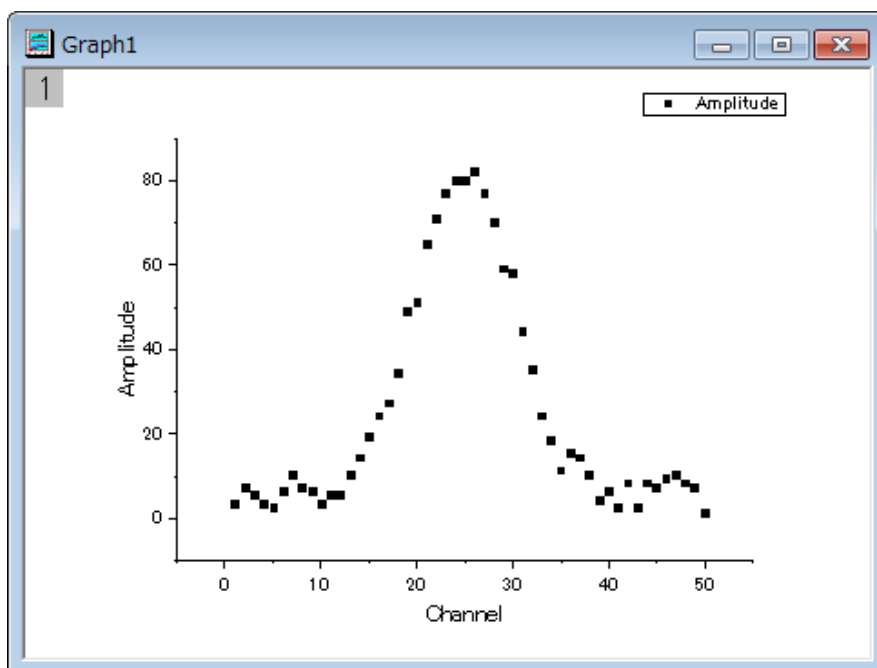
- ラベルボックスをクリックして選択し、Delete キーを押して削除します。三角形ボタン をクリックして、メニューから設定...を選択します。クイックフィット設定ダイアログが開きます。ラベルボックススタブを開き、グラフラベルボックスを付加のチェックを外して OK ボタンをクリックします。
- 矢印ボタン を再度クリックし、全ての曲線で出力を選択して、全てのデータプロットに対して、設定した線形フィットが実行されるようにします。
- 矢印ボタン をもう一度クリックし、メニューからレポートシートに行くを選びます。3つのデータセットに対すつフィット結果が入力されたレポートシートが開きます。Note: 上記のステップ 6 で最初の結果行が作成されます。最後の 3 行が現在の結果です。

Long Name	Function	Input	Range	Output	Equation	Weighting	G(Y)	H(yEr?)	I(Y)	J(yEr?)
1	Linear	Sensor A y	[1*:38*]	#####	$y = \text{Intercept} + \text{Slope} * x$	No Weighting	-0.00289	0.00393	0.00194	1.14325E-4
2	Linear	Sensor A y	[1*:38*]	#####	$y = \text{Intercept} + \text{Slope} * x$	No Weighting	-0.00289	0.00393	0.00194	1.14325E-4
3	Linear	Sensor B y	[1*:38*]	#####	$y = \text{Intercept} + \text{Slope} * x$	No Weighting	-0.02068	0.00442	0.00478	1.27723E-4
4	Linear	Sensor C y	[1*:38*]	#####	$y = \text{Intercept} + \text{Slope} * x$	No Weighting	-0.00389	0.00451	0.00882	1.29786E-4

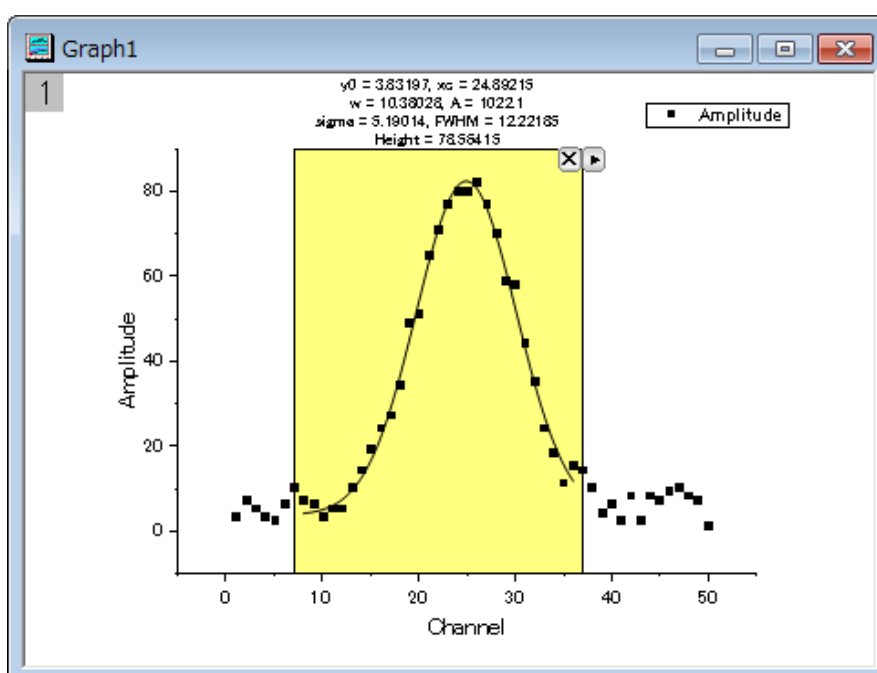
Note: ROI ボックスが表示されたグラフで、矢印ボタン を押すとフライアウトメニューが開き、線形フィットツールに切り替えを選択すると、現在の設定のまま線形フィットダイアログが開きます。さらに詳細な線形フィットのダイアログで操作が行えます。



非線形曲線フィット

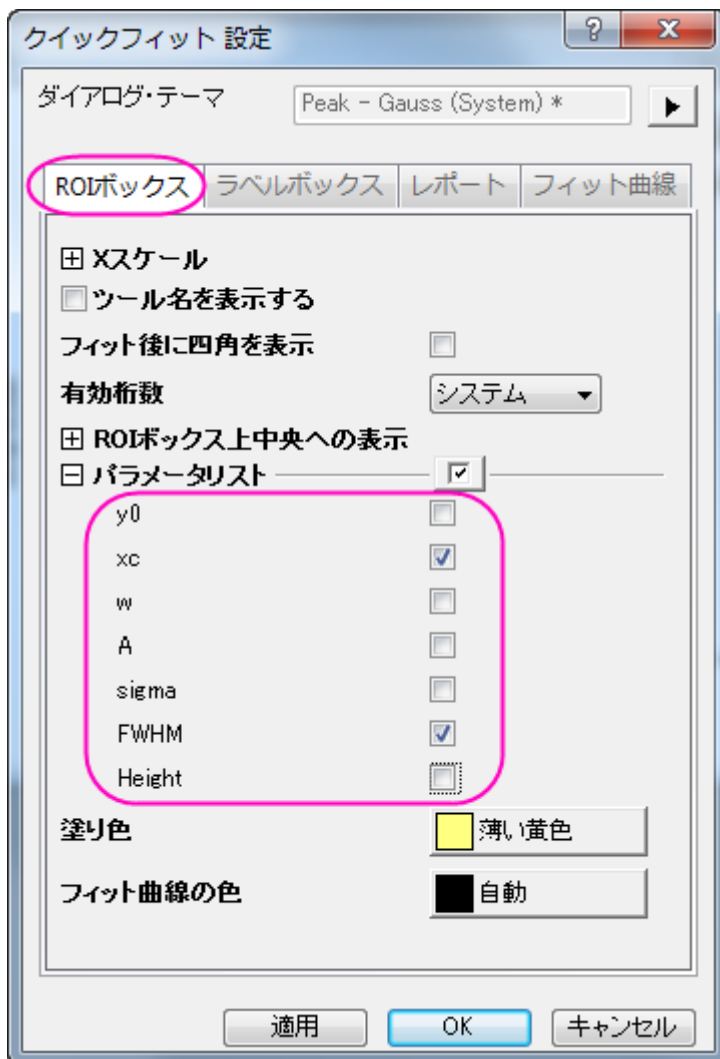
1. 新規ワークブックを作成して、<Origin プログラムフォルダ>\Samples\Curve fitting にある Origin のサンプルデータ、**Gaussian.DAT** をインポートします。
2. 列 B を選択して Origin メニューから**作図: 散布図: 散布図**を選択して、散布図を作成します。




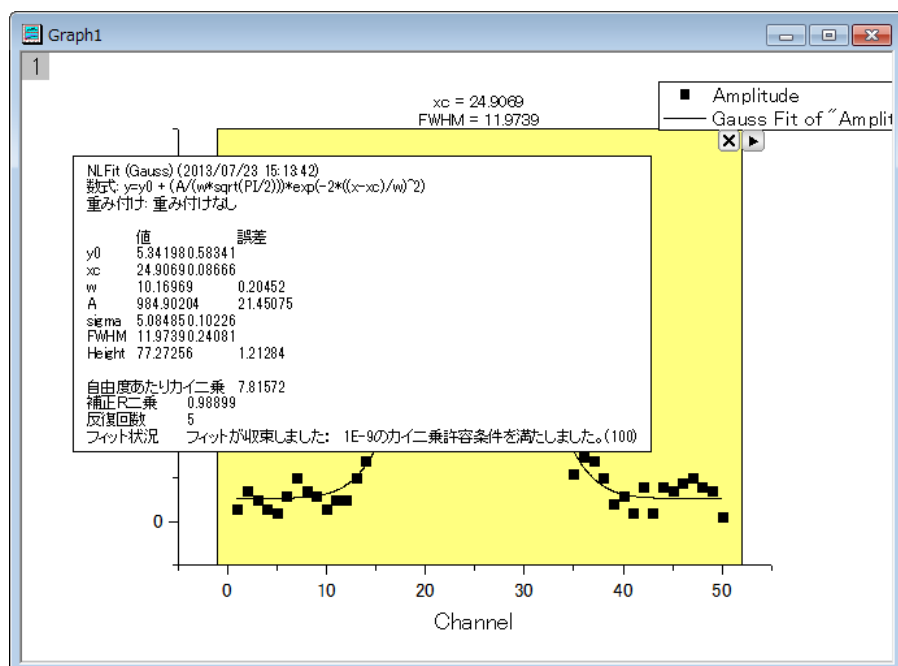
3. メインメニューの**ガジェット: クイックフィット: 4 Peak - Gauss (System)**を選択すると、ROI(Region of Interest)ボックスがグラフ内に表示されます。




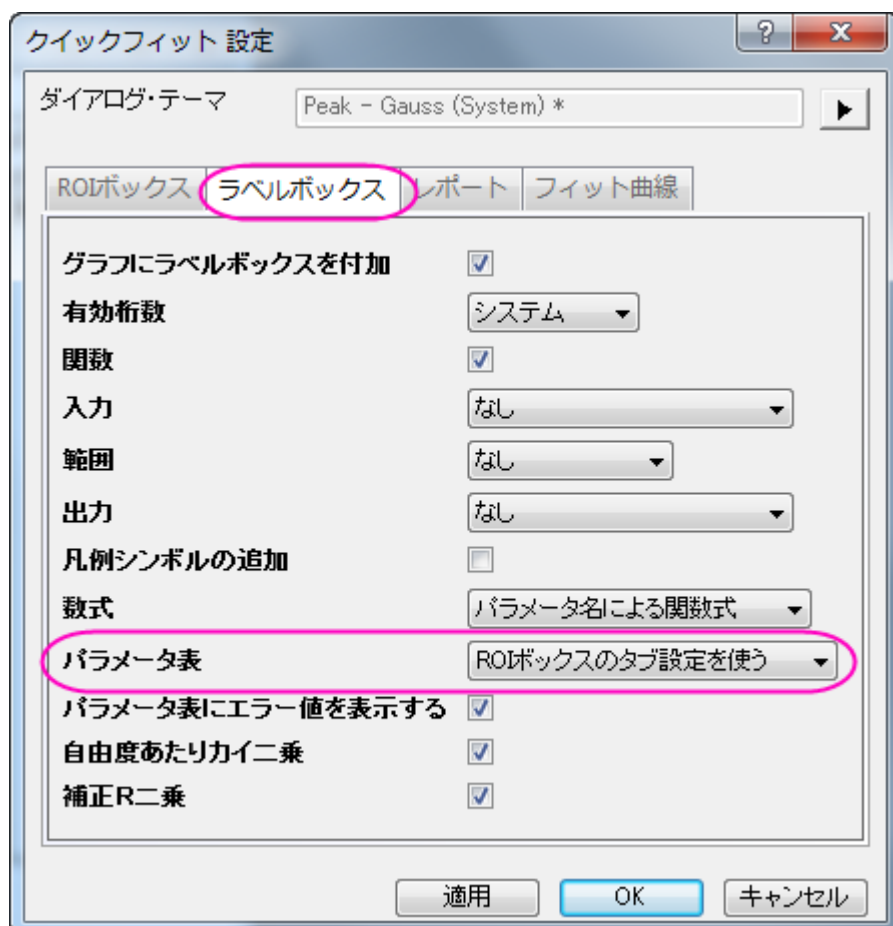
4. 三角形ボタン  をクリックし、**プロット群の最大範囲に拡大する**をメニューから選択して、ROI ボックスを最大範囲に拡大します。
5. 三角形ボタン  をクリックして、メニューから**設定...**を選択します。**クイックフィット設定**ダイアログが開きます。このダイアログ内では、**ROI ボックス**タブを開き、**パラメータリスト**を下図のように設定します。




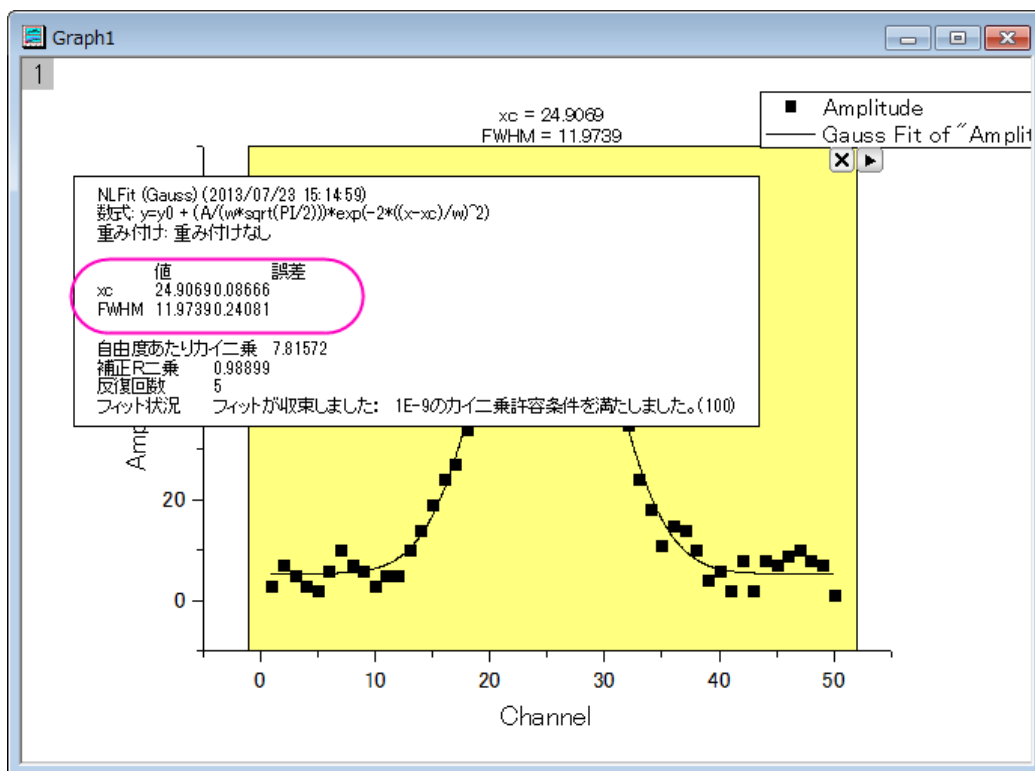
6. **OK** ボタンをクリックして、ダイアログボックスを閉じます。三角形ボタン  をクリックして、フライアウトメニューから**新しい出力**を選択します。下図のようにラベルボックスが追加されます。




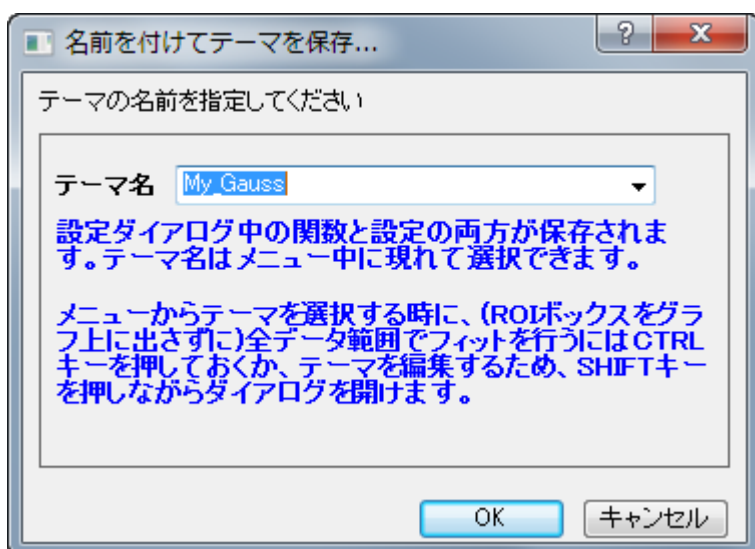
7. 三角形ボタン  をクリックして、メニューから**設定...**を選択します。**クイックフィット設定**ダイアログが再度開きます。ダイアログのラベルボックスタブを開き、**パラメータ表**ドロップダウンリストから**ROIボックスのタブ設定を使う**を選択します。**OK** ボタンをクリックして、ダイアログボックスを閉じます。




8. 三角形ボタン  をクリックして、フライアウトメニューから**最後の出力を更新**を選択します。ラベルボックスが更新され、 x_c と FWHM のみがパラメータとして表示されました。

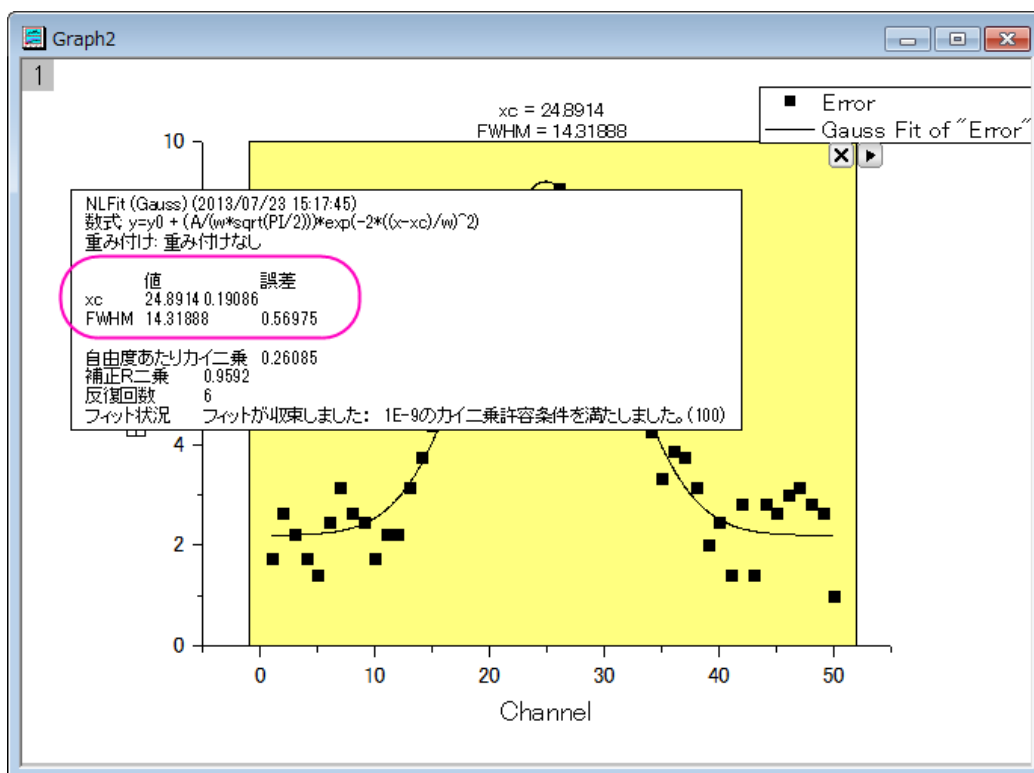



9. 三角形ボタン  をクリックして、フライアウトメニューからテーマに名前を付けて保存を選択します。開いたダイアログで、テーマ名を My_Gauss とし、OK ボタンをクリックします。



10. ワークシートに戻り、C列を選択して作図: 散布図: 散布図を選択します。下図のようなグラフが作成されます。
11. メインメニューのガジェット: クイックフィット: 9 MyGauss を選択して保存したテーマをロードします。グラフ内に ROI ボックスが表示され、ボックス上部にパラメータ x_c と FWHM が表示されます。

12. 三角形ボタン  をクリックし、**プロット群の最大範囲に拡大する**をメニューから選択して、ROI ボックスを最大範囲に拡大します。そして、**新しい出力をフライアウトメニューから**選択します。グラフに追加されたラベルボックスには、xc と FWHM のみがパラメータとして表示されているのが確認できます。



Note: ROI ボックスが表示されたグラフで、矢印ボタン  を押すとフライアウトメニューが開き、**NLFitに行く**を選択すると、現在の設定のまま **NLFit** ダイアログが開きます。引き続き、非線形フィットダイアログでさらに詳しく設定した操作が可能です。



4.1.8. クイックピークガジェット

サマリー

クイックピークガジェットは ROI(Region of Interest, 関心領域)内でのピーク検索、基線の減算、ピークの積分、フィットを実行できます。また、ピークアナライザと連携することもできます。詳細はこのチュートリアルをご覧ください。




必要な Origin のバージョン: Origin 2015 SR1

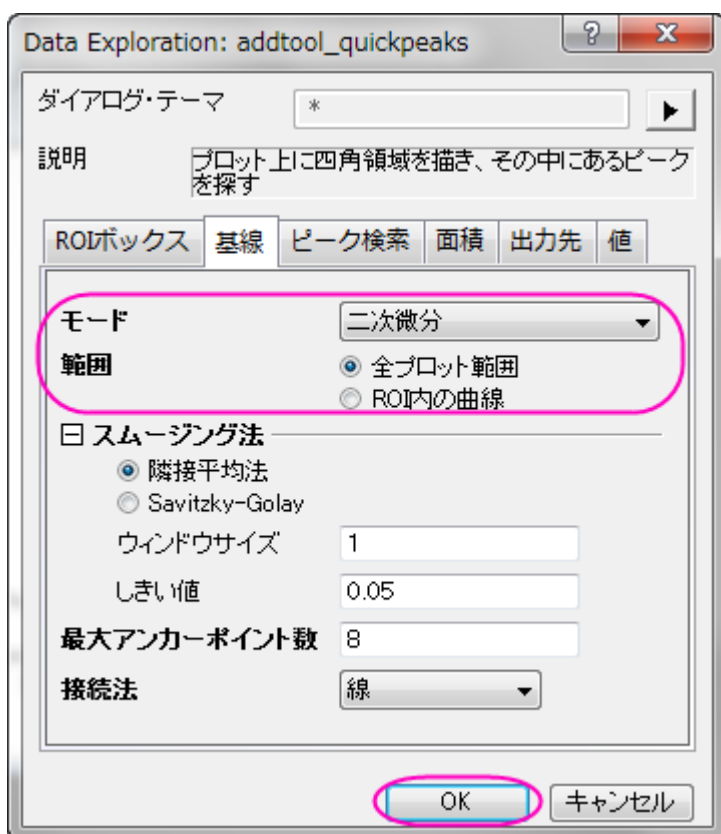
学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

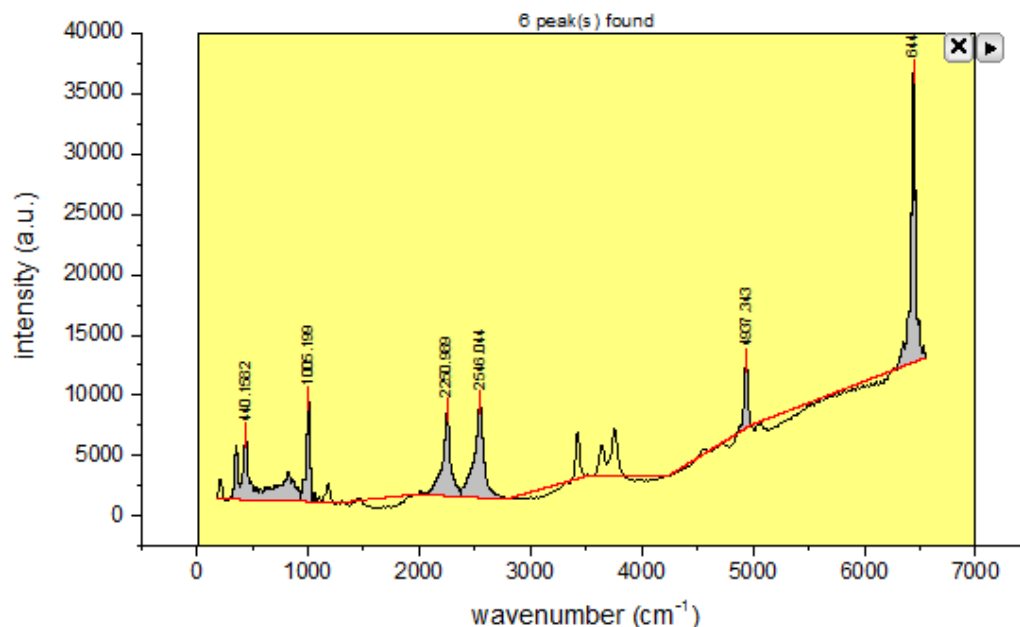
- クイックピークガジェットスペクトルのベースラインを検索し、減算する
- クイックピークガジェットを使用してグラフ内のピークを検索する
- 設定をカスタマイズする

ステップ

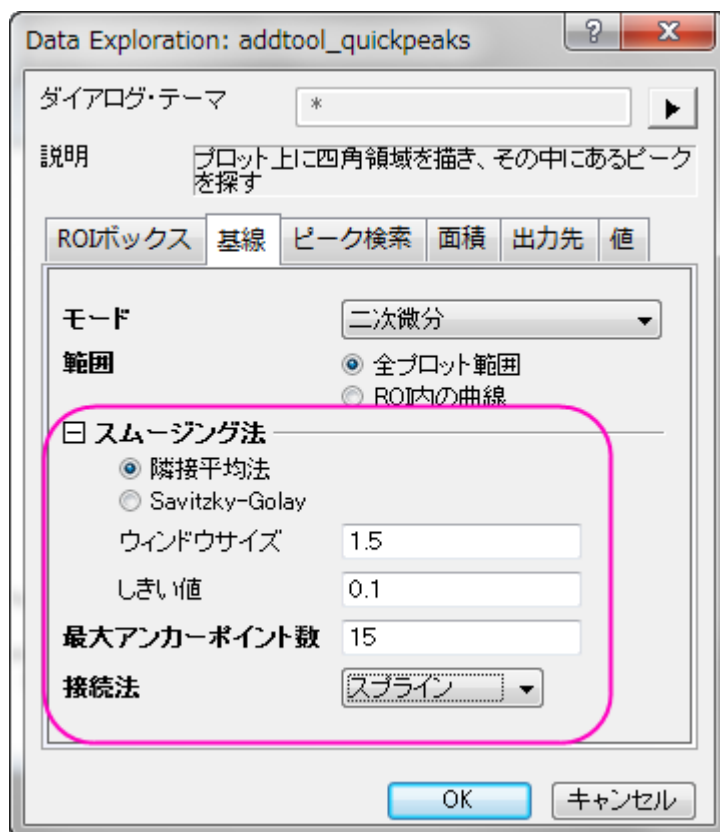
1. 新規ワークブックボタン  をクリックして新しいワークブックを作成します。単一 ASCII のインポートボタン  をクリックし、Zircon.dat ファイルを <Origin フォルダ>\Samples\Spectroscopy のパスから開きます。これら 2 つのボタンは両方とも標準ツールバーにあります。
2. 列 B を選択して、2D グラフギャラリーツールバーの折れ線  ボタンをクリックして折れ線グラフを作成します。
3. Origin メニューからガジェット:クイックピークを選択し、Data Exploration: addtool_quickpeaks ダイアログボックスを開きます。
4. 基線タブを開き、モードを二次微分にし、範囲を全プロット範囲に変更します。OK をクリックして適用します。



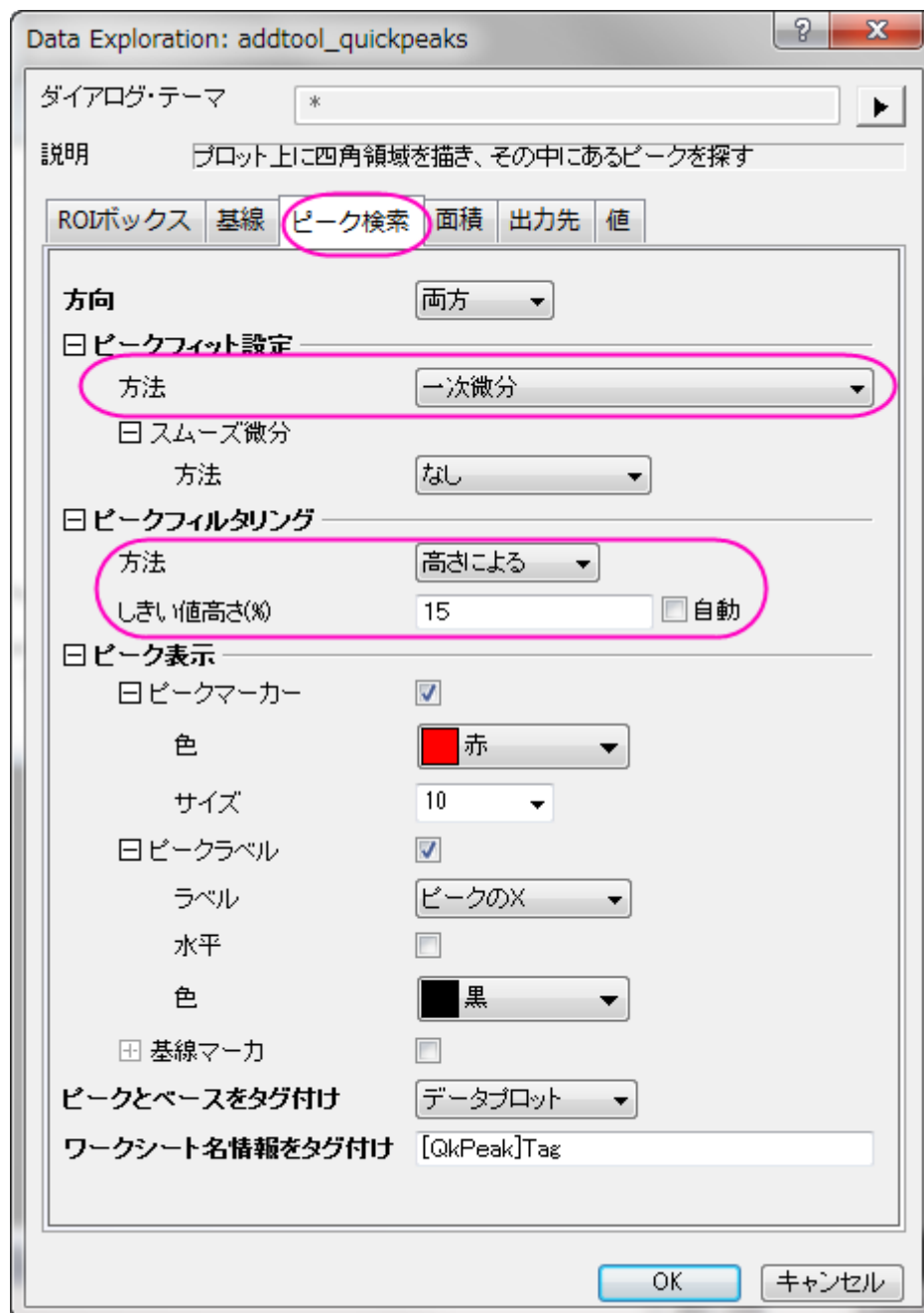
5. 黄色い ROI ボックス内のピークが検出され、マークが付きます。ROI ボックスのサイズを変更して、グラフ内の X 範囲が[0,7000]の部分を含みます。ベースラインとピークの検索のために設定を変更する必要があるようです。



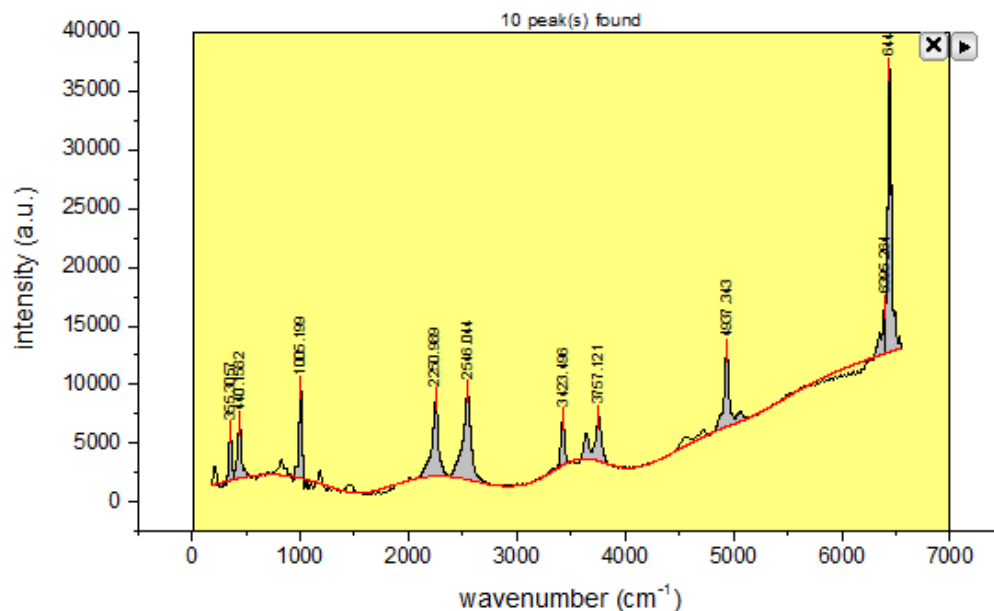
6. 三角形のボタン▶をクリックして、メニューから設定を選択し、**基線**タブのスムージング法の項目を次のように調整します。




適用をクリックし、**ピーク検索**タブを開いて値を調節します。




7. OKをクリックして設定を適用し、ダイアログを閉じます。しきい値と最大アンカーポイントを変更したことで基線が、しきい値高さを変更したことでピークがうまく検出されたのがわかります。



8. 三角形ボタン  をクリックして、メニューから新しい出力を選択するとピーク検索の結果がレポートシートに出力します。

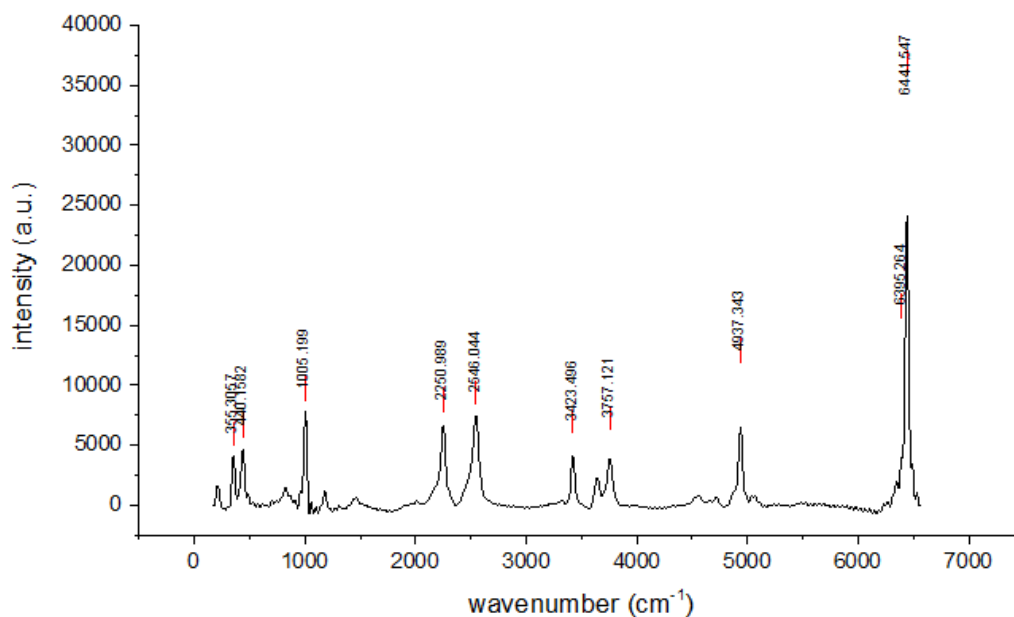
もう一度フライアウトメニューを開き、レポートシートに行くを選択すると、出力ワークシートを確認できます。

Peak ID	Peak Row	Peak X	Peak Y	Height	Peak Area	FWHM
				Peak Height from Baseline		
Peak 1	94	355.3057	5883.32381	4019.38518	105810.63852	31.85037
Peak 2	138	440.1582	6622.58143	4579.30486	212770.49866	38.0693
Peak 3	431	1005.199	9687.95699	7641.00995	262292.12444	31.93732
Peak 4	1077	2250.989	8735.86589	6521.97313	477231.3539	49.19588
Peak 5	1230	2546.044	9375.11743	7460.46176	686897.33207	67.08458
Peak 6	1685	3423.496	7014.48113	3883.05102	160646.49519	37.93742
Peak 7	1858	3757.121	7245.12389	3742.14765	359968.10298	153.43826
Peak 8	2470	4937.343	12846.63008	6434.46253	432380.73801	42.80683
Peak 9	3226	6395.264	16607.24058	3959.88794	180348.37354	27.24009
Peak 10	3250	6441.547	36844.54608	24051.37853	1.07438E6	37.18174

9. ガジェットを適用したグラフウィンドウをアクティブにして、三角形のボタン  をクリックし、基線の減算を選択します。

確認メッセージは OK をクリックしてデータからベースラインを減算します。

ガジェットの右上にある X ボタンをクリックしてガジェットを閉じます。最終的なグラフは下図のようになります。



Note:フィット時の詳細

設定を行う場合はクイックピークガジェットとピークアナライザを組み合わせて使用します。



4.1.9. クイックシグモイダルフィットガジェット

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ステップ](#)
 - [3.1 クイックフィット](#)
 - [3.2 NLFitに接続](#)
 - [3.3 X,Y 値を検索](#)

サマリー

クイックシグモイダルフィットガジェットはユーザがインタラクティブに操作できる ROI 領域に指定したグラフの一部分に、すばやくシグモイダルフィットを実行できるツールです。

必要な Origin のバージョン: Origin 2015 SR0 以降

学習する項目

- グラフ上でクイックシグモイダルフィットガジェットを使う
- フィットオプションを選択する

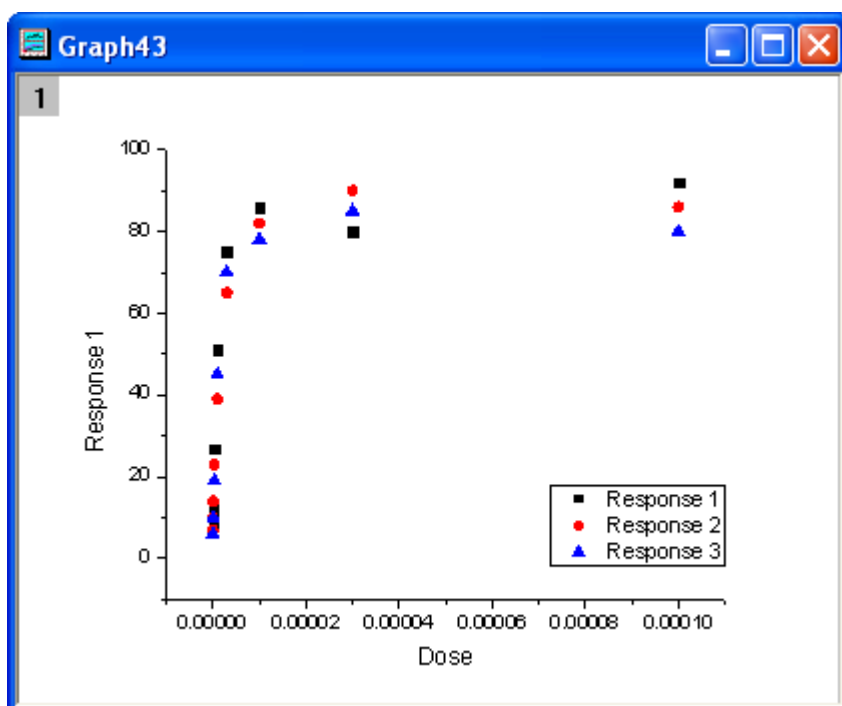
- NLFit ダイアログに切り替える
- フィット結果を出力する
- フィット曲線上で X/Y 値を探す

ステップ

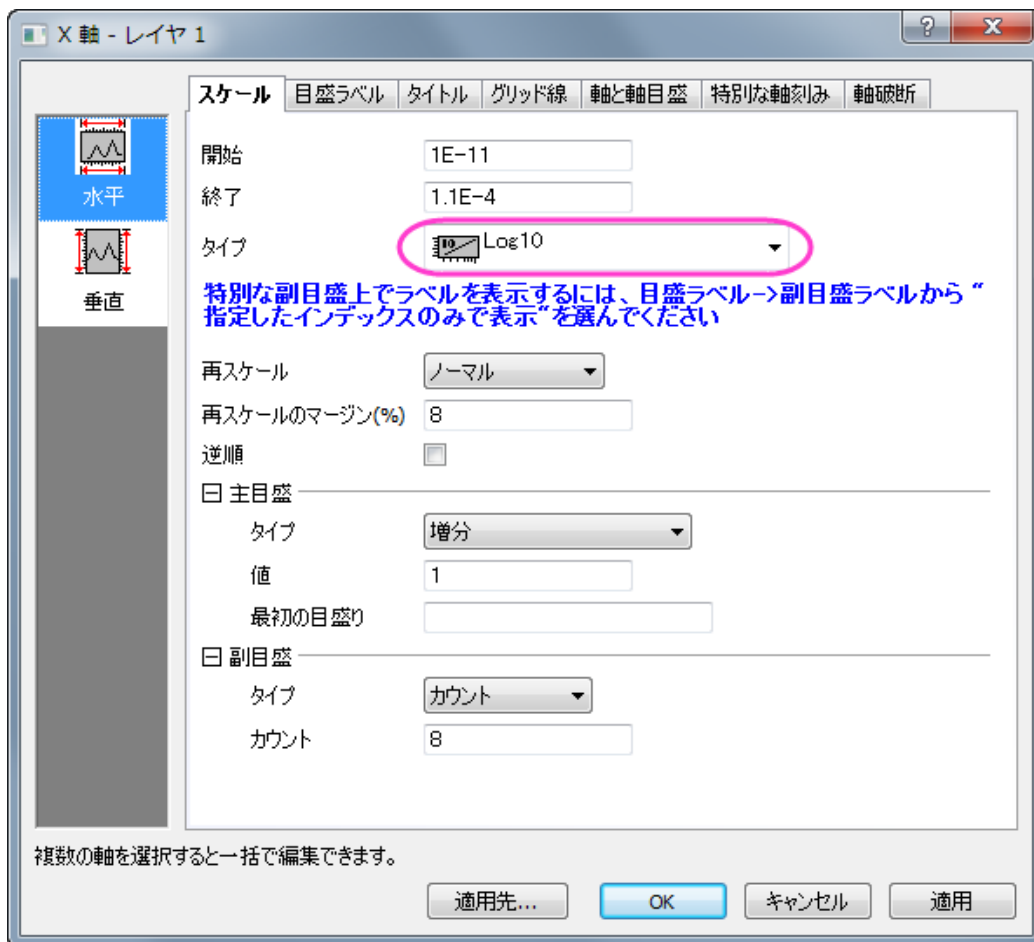
このチュートリアルは、チュートリアルデータプロジェクト(<Origin EXE フォルダ>\Samples\TutorialData.opj)と関連しています。


クイックフィット

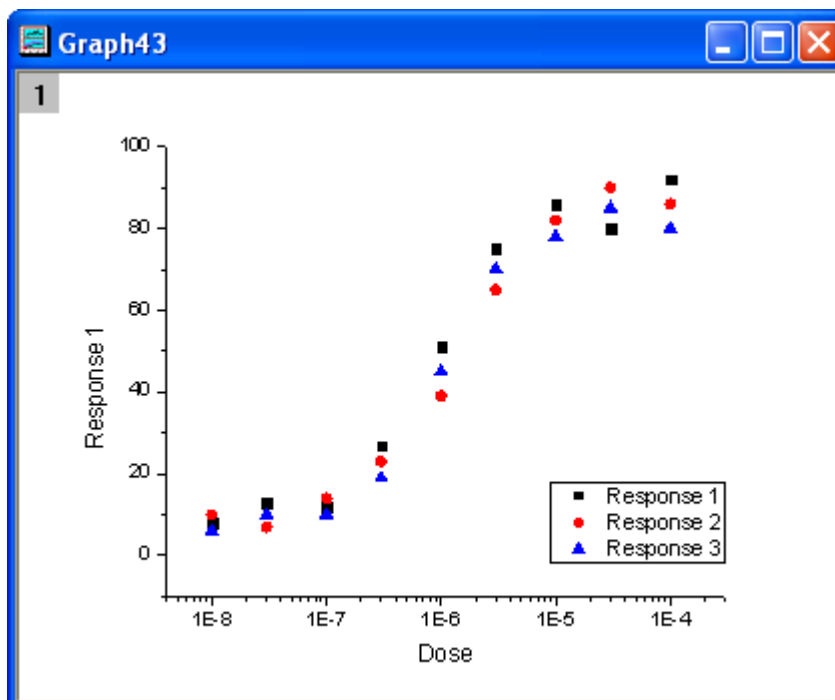
1. TutorialData.opj を開き、プロジェクトエクスプローラで **Quick Sigmoidal Fit Gadget** フォルダを開きます。
2. **DoseResponseN** ワークブックを選択し、列 A から D を選択します。メニューから **作図: 散布図: 散布図** と選択して散布図を作成します。



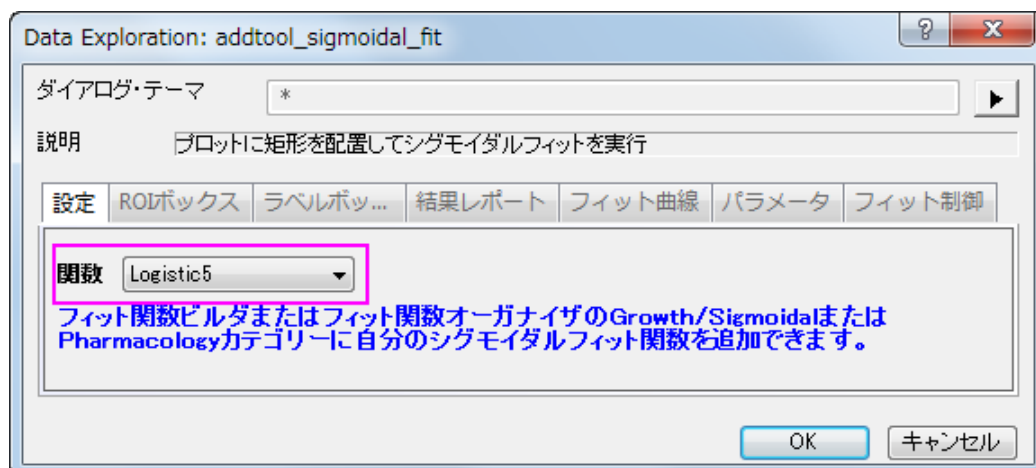
3. X 軸をダブルクリックして、**X 軸**ダイアログを開きます。スケールタブで、**タイプ**を *Log10* に変更して **OK** ボタンをクリックします。



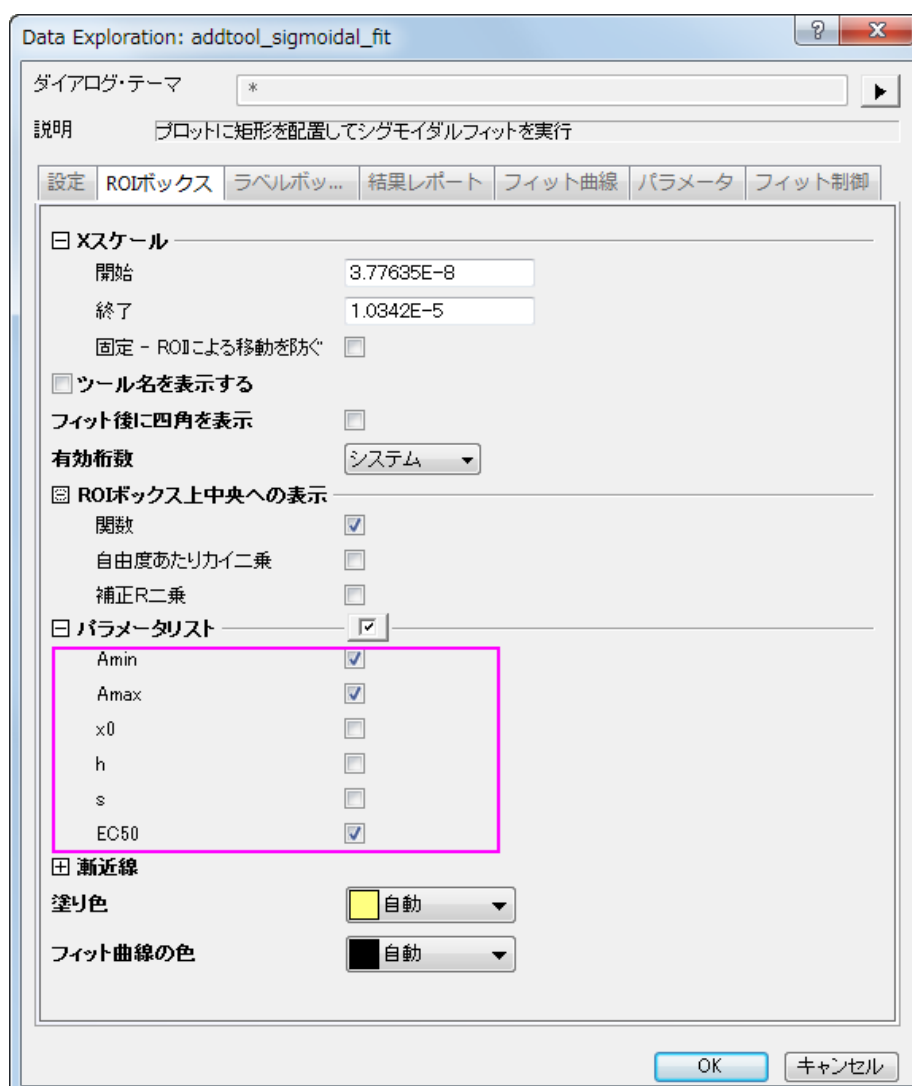
4. 再スケールボタン  をクリックしてプロットのスケールを調整します。



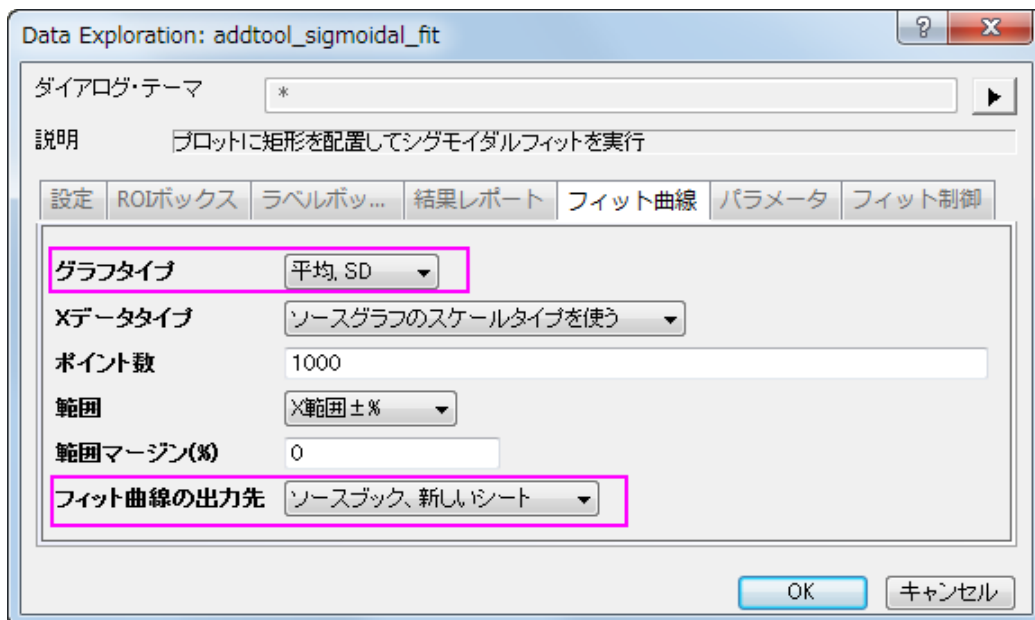
5. メインメニューから**ガジェット: クイックシグモイダルフィット**を選択し、**addtool_sigmodal_fit** ダイアログを開きます。
設定タブの関数ドロップダウンリストから **Logistic5** を選んでください。




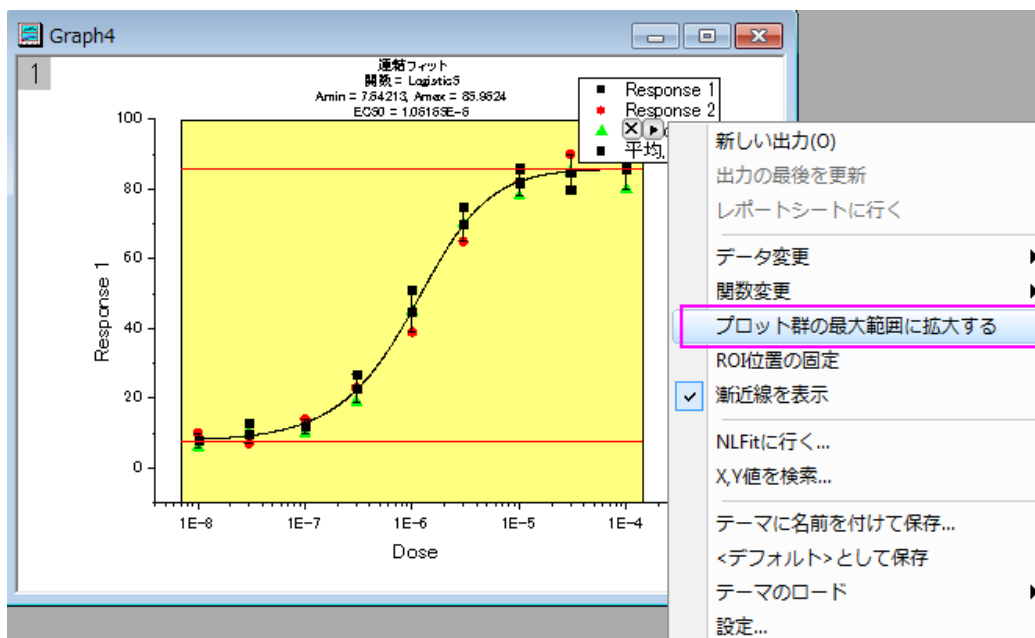
6. **ROI ボックス**のタブを開き、**パラメータリスト**のブランチ内にあるパラメータ x_0 、 h 、 s のチェックを外します。




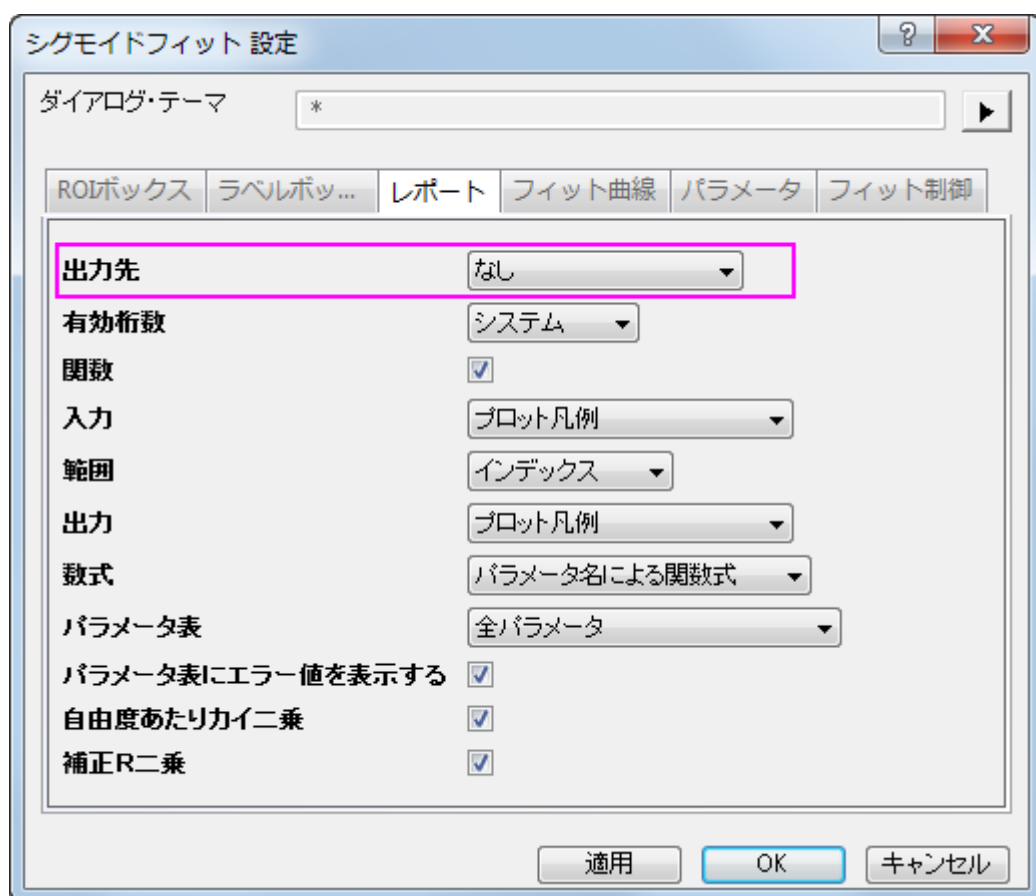
7. **フィット曲線**タブを開き、**グラフタイプ**のドロップダウンリストから**平均、SD**を選びます。そして、**フィット曲線**の出力先のドロップダウンリストからは**ソースブック、新しいシート**を選びます。




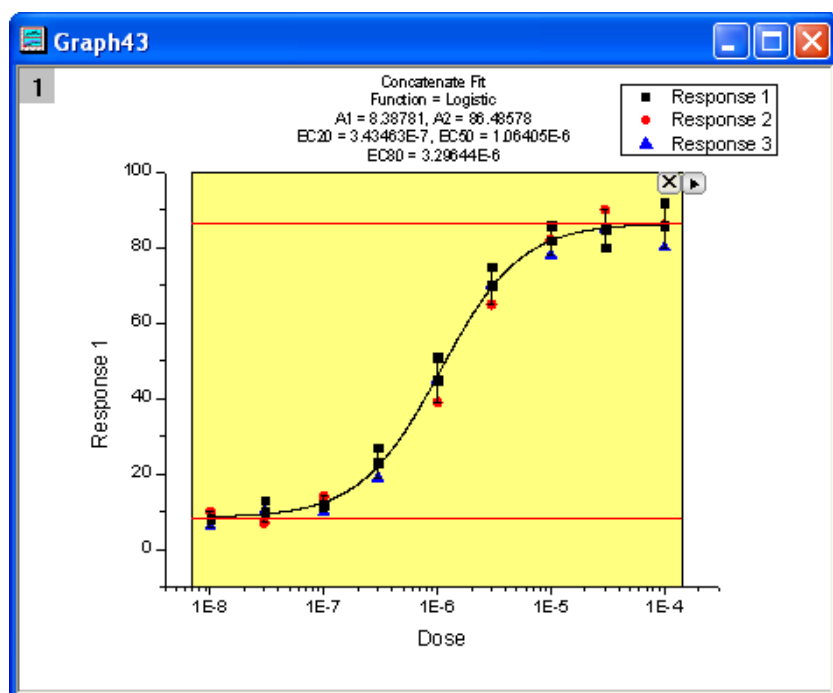
8. **OK** ボタンをクリックし、ROI ボックスをグラフに追加します。ROI ボックスの右上角には三角形のボタン  があるのでそれをクリックし、コンテキストメニューから**プロット群の最大範囲に拡大する**を選択します。ROI ボックスはグラフ上の全範囲をカバーします。




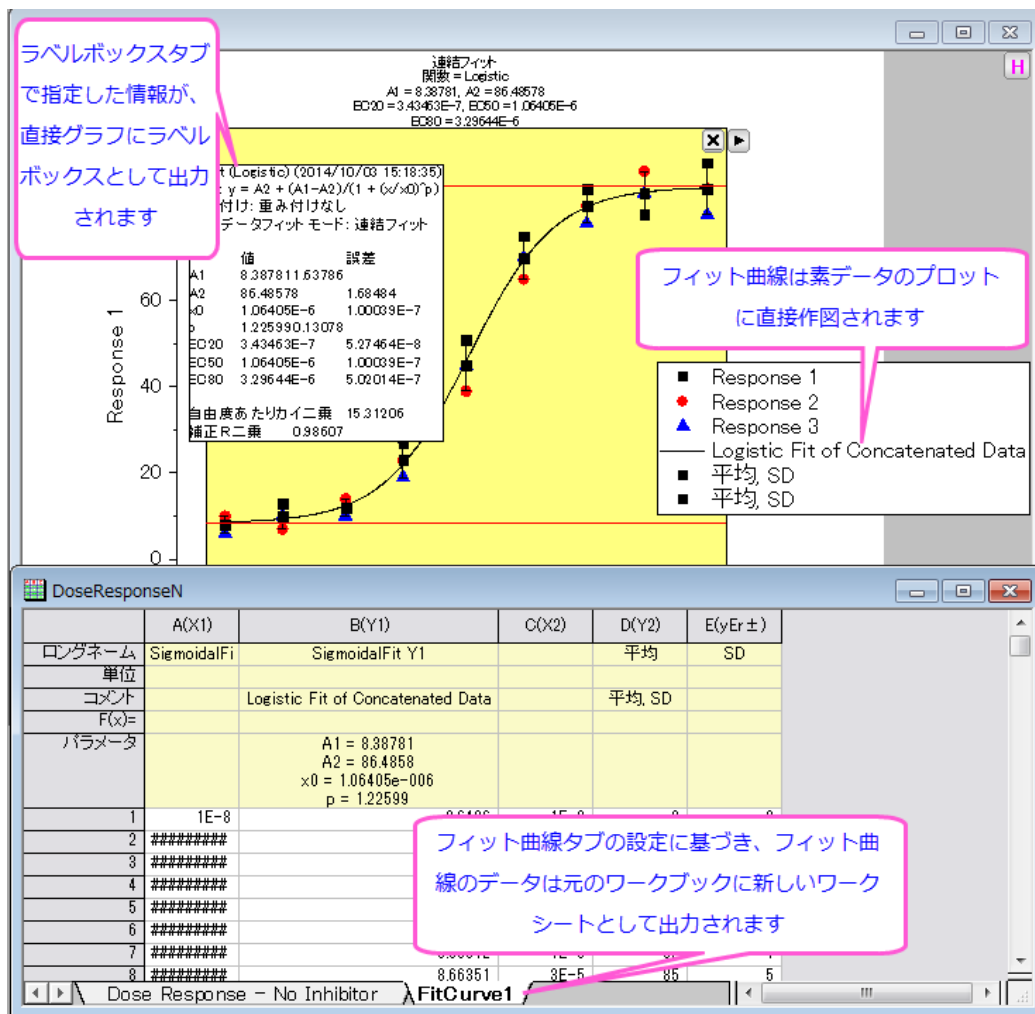
9. 再び三角形ボタン  をクリックして、メニューから**設定...**を選択します。**シグモイドフィット設定**ダイアログが再度開きます。このダイアログ内では**レポート**タブを開き、**出力先**を「なし」に設定します。



10. **OK** をクリックして、ダイアログを閉じます。三角形ボタン  をクリックし、コンテキストメニューから **関数変更: Logistic** を選び、フィット関数を Logistic に変更します。ROI ボックスの上にあるラベルは、自動的に更新されます。



11. 再度三角形ボタン  をクリックして新しい出力を選び、フィット結果をワークシートとグラフに出力します。



ラベルボックスタブで指定した情報が、直接グラフにラベルボックスとして出力されます

フィット曲線は素データのプロットに直接作図されます


フィット曲線タブの設定に基づき、フィット曲線のデータは元のワークブックに新しいワークシートとして出力されます

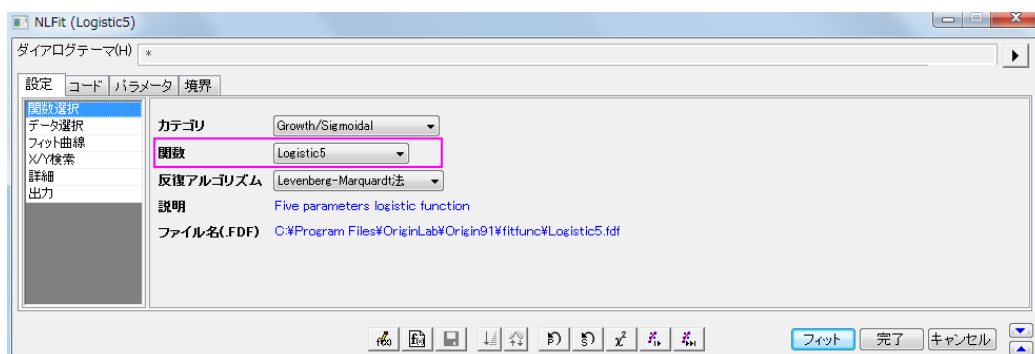
パラメータ	値	誤差
A1	8.38781163786	
A2	86.48578	1.68484
x0	1.06405E-6	1.00039E-7
p	1.22599013078	
EC20	3.43463E-7	5.27464E-8
EC50	1.06405E-6	1.00039E-7
EC80	3.29644E-6	5.02014E-7

パラメータ	値	誤差
A1	8.38781	
A2	86.4858	
x0	1.06405e-006	
p	1.22599	

NLFit に接続

クイックモイダルフィットガジェットを使用している時は、簡単に NLFit に切り替えが出来ます。これにより、ガジェット内の設定で詳細なフィット結果のレポートを表示できます。

1. 上記のステップ 1 からステップ8までをやり直してください。
2. 三角形ボタン  をクリックし、NLFit に行く...を選んでガジェットの設定を引き継いだ NLFit ダイアログを開きます。



NLFit (Logistic5)

ダイアログテーマ(H) *

設定 コード パラメータ 境界

カテゴリ Growth/Sigmoidal

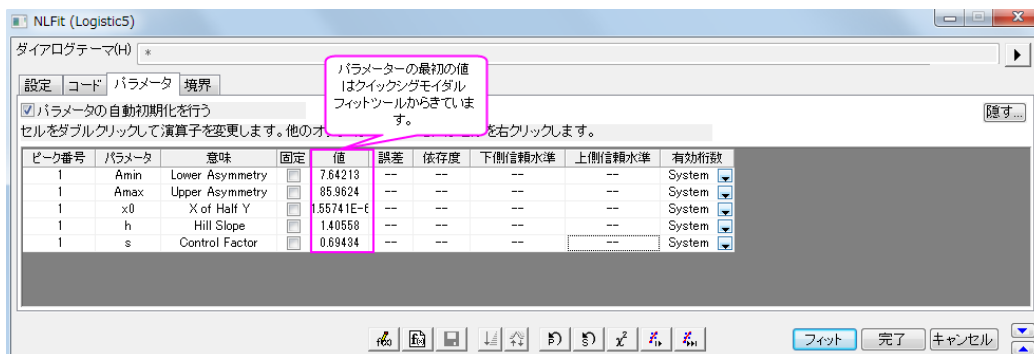
関数 Logistic5

反復アルゴリズム Levenberg-Marquardt法

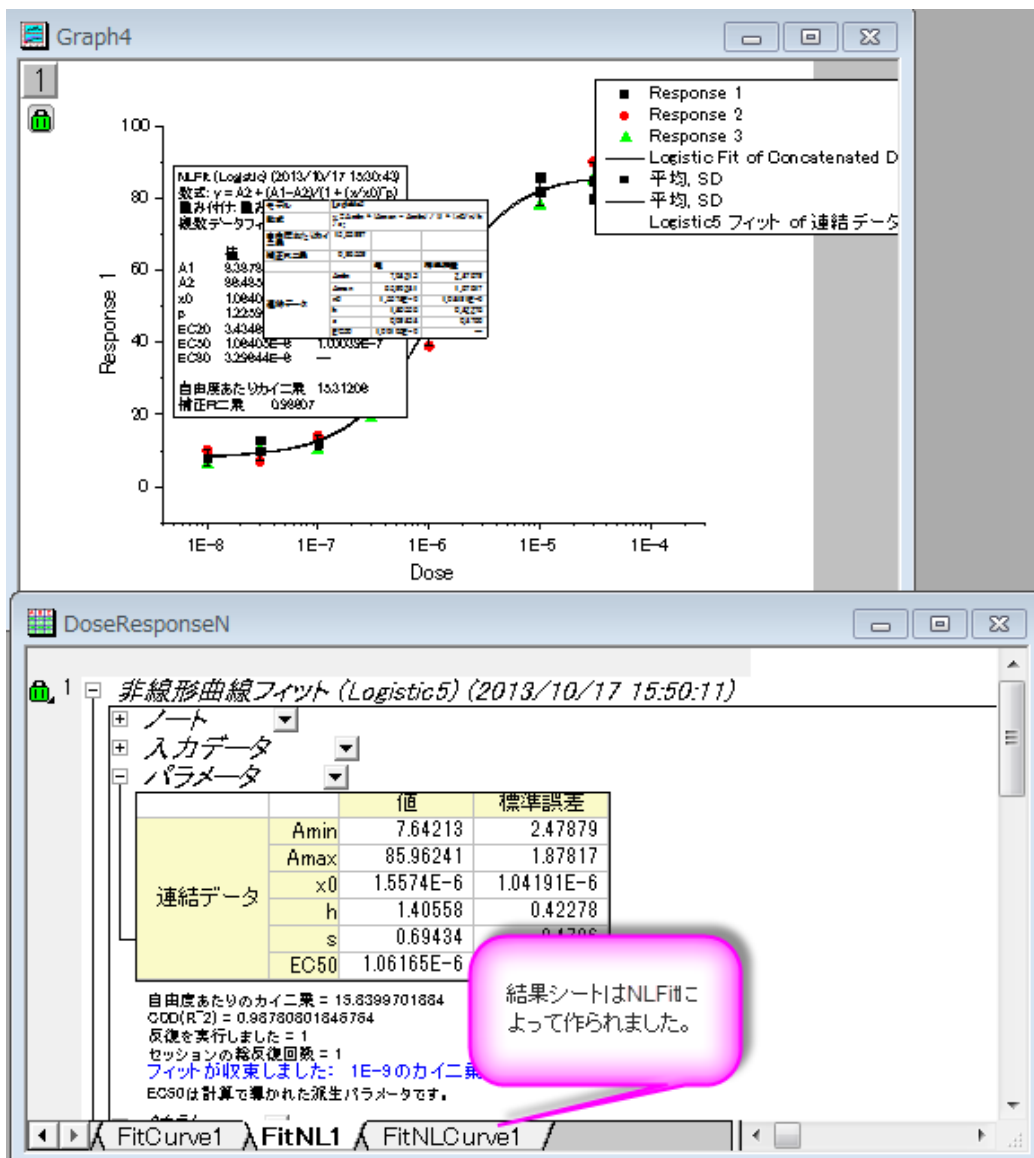
説明 Five parameters logistic function

ファイル名(FDF) C:\Program Files\OriginLab\Origin91\fitfunc\Logistic5.idf

フィット 完了 キャンセル




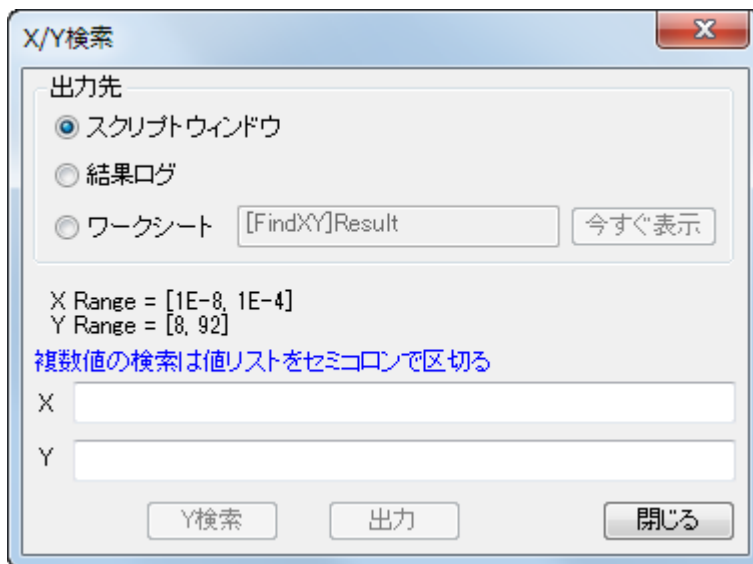
3. フィットボタンをクリックすると、曲線フィットを実行します。フィット結果は、結果シートの出力と元のグラフに表示されます。フィット結果はソースシートに出力されます。



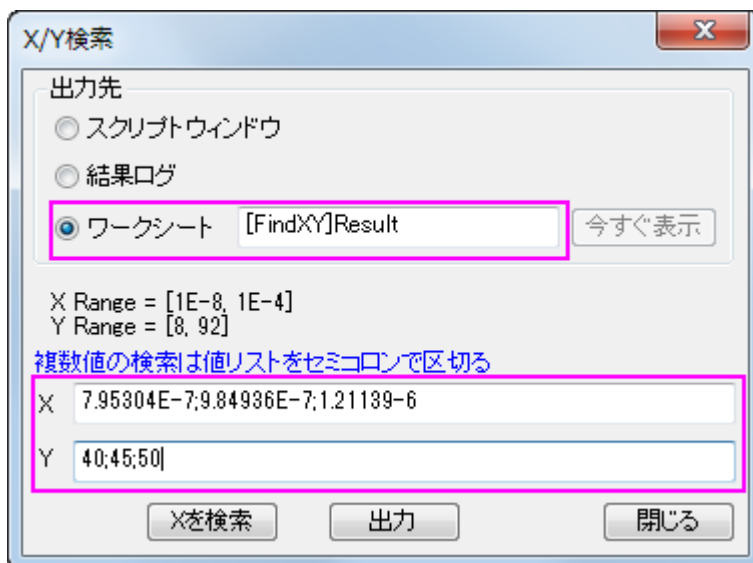
X/Y 値を検索

このガジェットでは、フィットした曲線上で X/Y の値をすばやく求めることができます。

1. 一番目のセクションにあるステップ 1 からステップ 8 までをやり直します。
2. 三角形ボタン  をクリックし、**X/Y 値の検索...** をメニューから選び、**X/Y 検索** ダイアログを開きます。



3. ワークシートのラジオボタンを選択して Y には 40;45;50 と入力し、**X を検索** をクリックすると対応する X の値が空欄の X ボックスに表示されます。それから**出力** ボタンをクリックすると、X と Y の値を指定したワークシートに出力します。



4. ワークシートラジオボタンを選択してから**今すぐ出力** ボタンをクリックすると、**FindX/Y** ワークブックを開きます。そして、**閉じる** ボタンをクリックして **X/Y 検索** ダイアログを閉じます。

	A(X)	B(Y)
ロングネーム	見つかったX	特定Y
F(x)=		
コメント	Xを検索: Logistic Fit(“Response 1”上)	
1	7.76901E-7	40
2	9.60933E-7	45
3	1.1845E-6	50
4		
5		
6		
7		

4.1.10. 複数のガジェットを使用する

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 複数のガジェットウィンドウのためのレイアウトを作る](#)
- [4 クイックピークガジェットを使って基線を検索する](#)
- [5 クイックフィットガジェットを使って曲線の線形フィットを探す](#)
- [6 交差ガジェットを使って交点を探す](#)
- [7 出力を更新する](#)

サマリー

複数のガジェットを組み合わせると、特定の目的を達成するために使用できます。同じプロットの上で複数のガジェットウィンドウが重なることを防ぐには、異なるレイヤに分けて異なるパネルに分けることができます。他のガジェットからの結果は最終的に最後のガジェットウィンドウに追加され、新しい出力の度に更新されます。このチュートリアルでは、**クイックピーク**、**クイックフィット**、**交差**の3種類のガジェットを使用して基線と曲線の傾きの交点を探す方法を示します。

必要な Origin のバージョン: Origin 2016 SR0

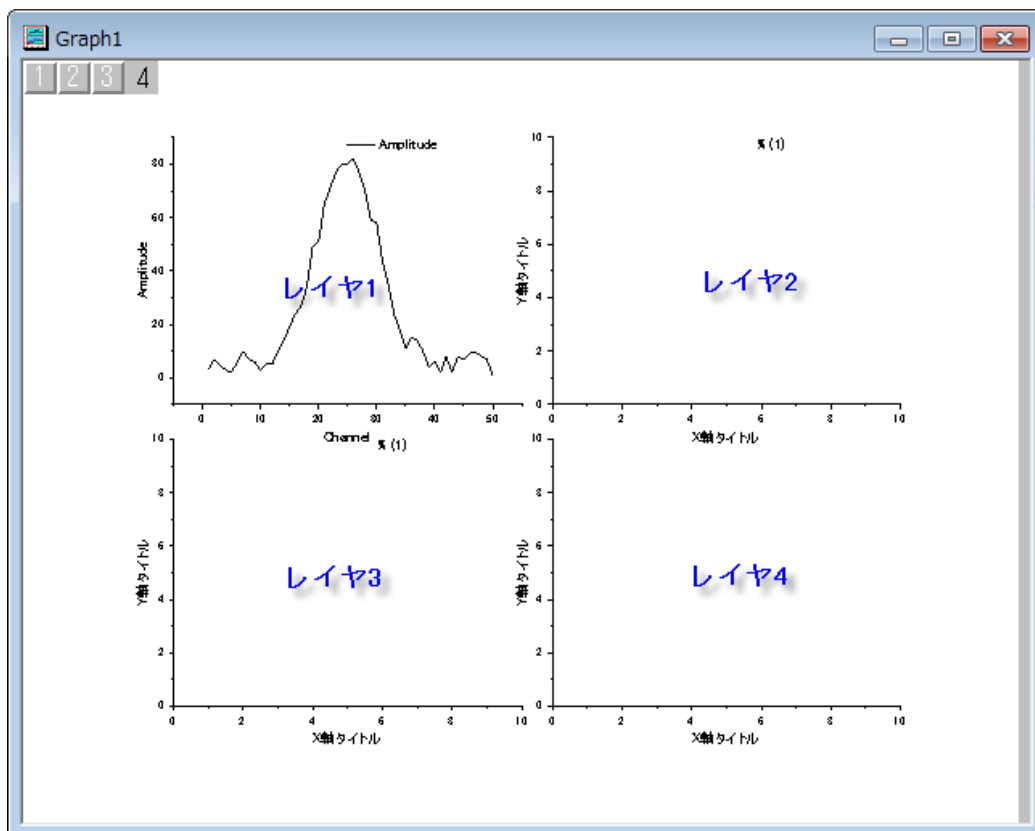
学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。


- 複数のガジェットを同時に使用して同じデータを分析する
- ガジェットの分析結果を特定のグラフに出力し、更新する
- 基線と曲線の線形フィット結果の交点を探す方法

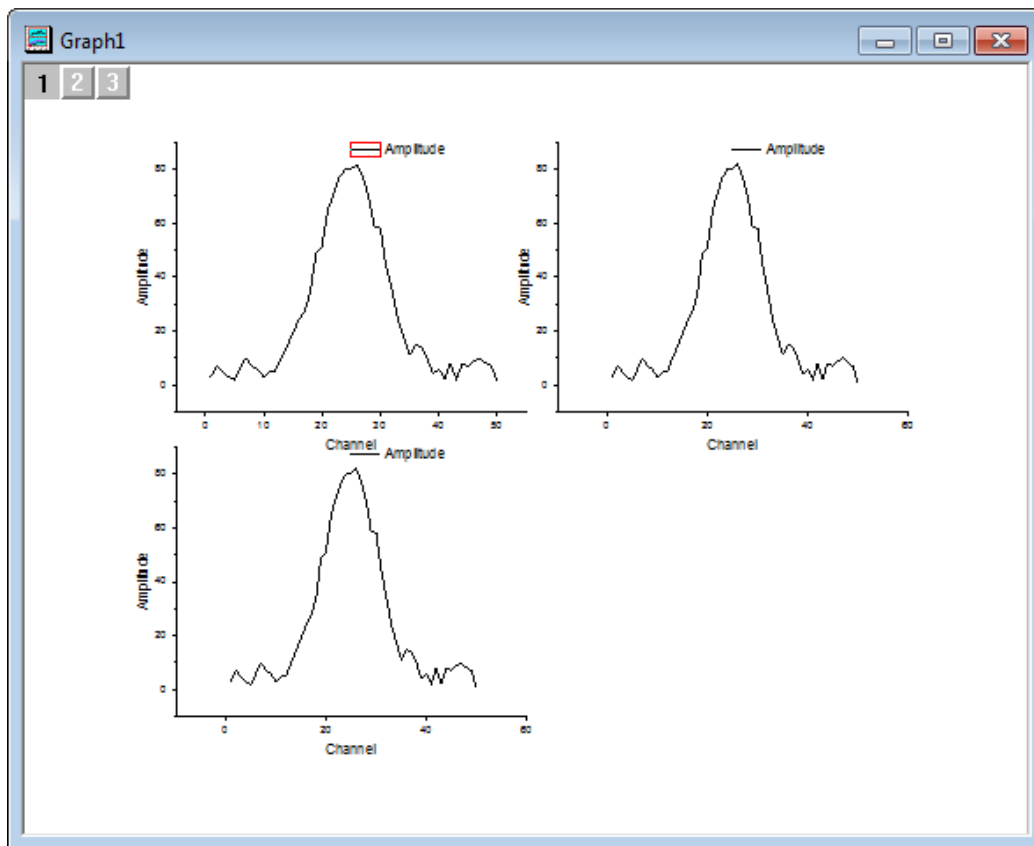
複数のガジェットウィンドウのためのレイアウトを作る

1. 新しいワークブックを開き、*Samples\Curve Fitting\Gaussian.dat* ファイルをインポートします。
2. 1つのグラフに複数のガジェットを重ねて使用することを避けるため、次のような複数レイヤグラフを作成し、同じデータを入力します。
3. 2列目をクリックして選択した後にメニューから**作図:複数パネル:4区分**と操作を行い、4区分のグラフを作図します。



Note: 上記画像はこれからの説明を分かりやすくする為に、どのパネルがどのレイヤか青い文字で示しました。

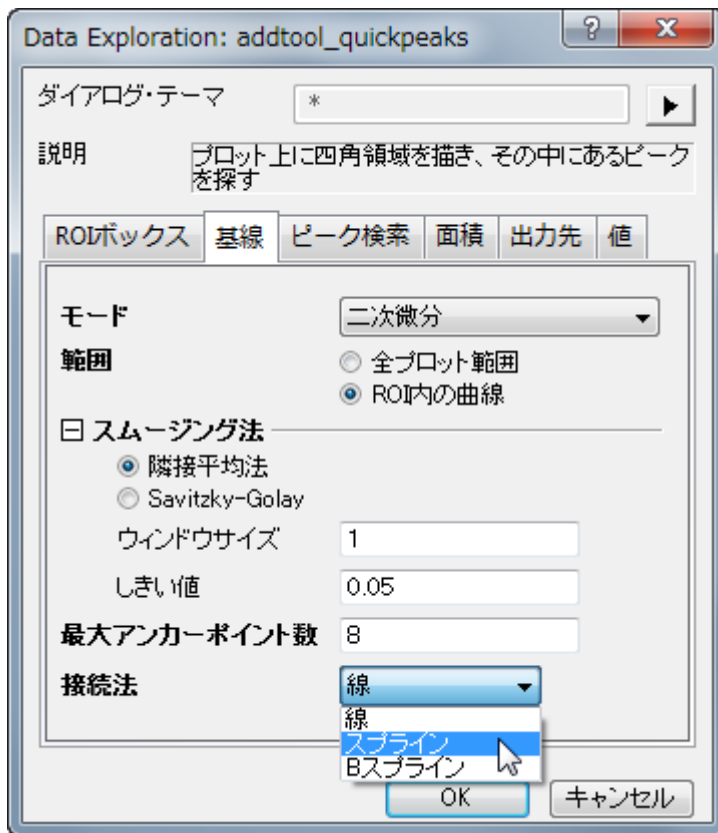
4. ワークブックに戻り、**Amplitude** 列を選択してマウスカーソルをその列の端に位置づけ、カーソルの形状が  に変わるようにします。カーソルの形状が変わったら、レイヤ 2 に向かい列 **Amplitude** をドラッグ & ドロップで入力します。ダイアログが表示されたら **OK** をクリックしてダイアログを閉じます。同じ事をレイヤ 3 に対しても行ってください。レイヤ 4 の枠(右下の部分)については必要ないので、選択してからキーボードの **Delete** キーを押して削除します。



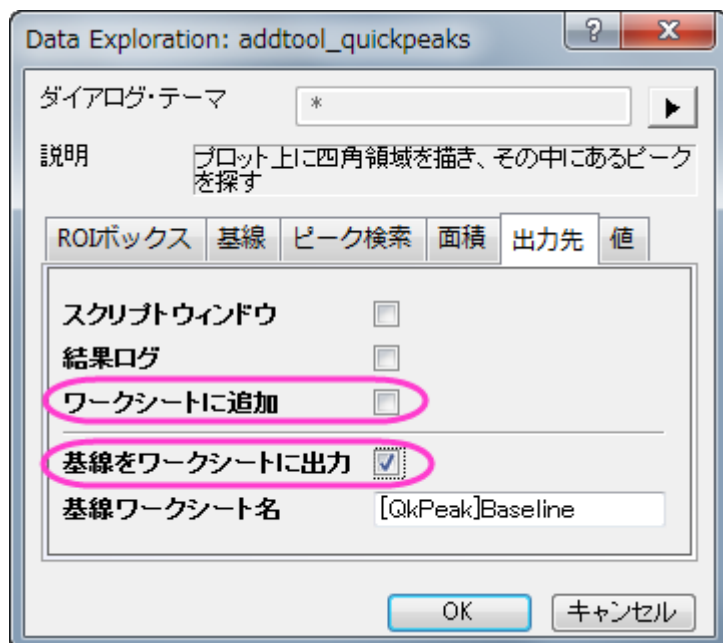
クイックピークガジェットを使って基線を検索する

1. グラフをアクティブにしてから、Originメニューでガジェット:クイックピークを選び、Data

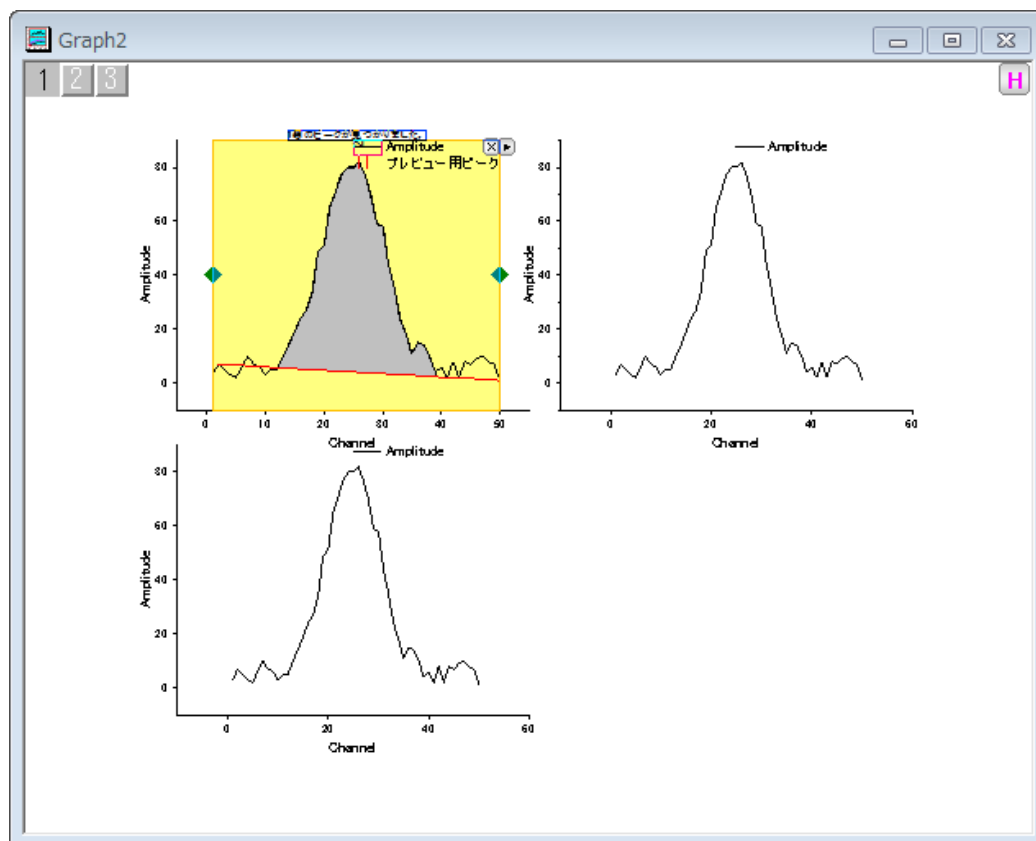
Exploration:addtool_quickpeaks ダイアログを開きます。折れ線グラフの曲線の基線の種類をスプライン接続に変更します。基線の線の種類を変更するには、**基線**タブを開き、**接続法**ドロップダウンリストで**スプライン**を選択します。これでアンカーポイントをスプライン法で接続します。




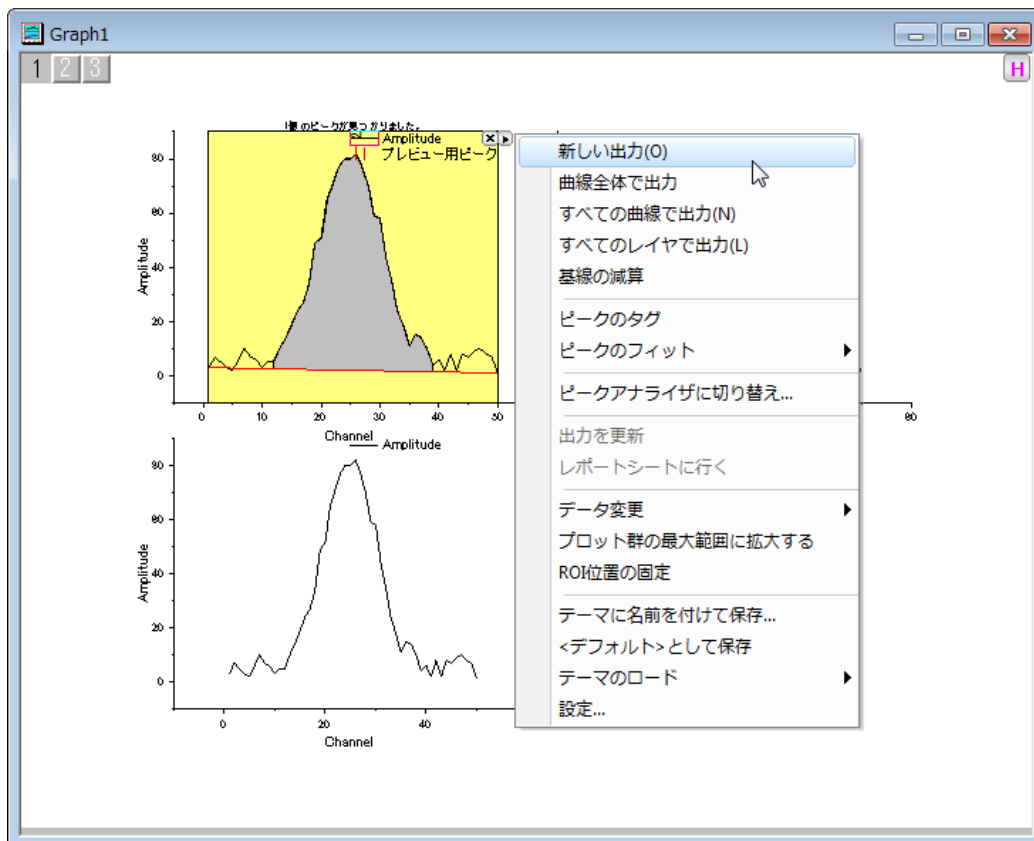
2. 基線データの出力に関しては、素データが入っているワークシートに新しい列を追加せず、新しいワークブックに作成した基線データを出力し、更新があるたびにデータを置き換えるようにします。設定には、**出力先**タブを開きワークシートに**追加**のチェックを外して**基線**をワークシートに**出力**にチェックを付けます。チェックを付けると表示されるテキストボックスに下図のように入力して、ワークブック名 QkPeak とワークシート名 Baseline に設定します。




3. **OK** をクリックしてダイアログを閉じます。ROI 領域(黄色の四角形)の境界に移動し、カーソルが両矢印になると、この ROI 領域のサイズを変更できます。

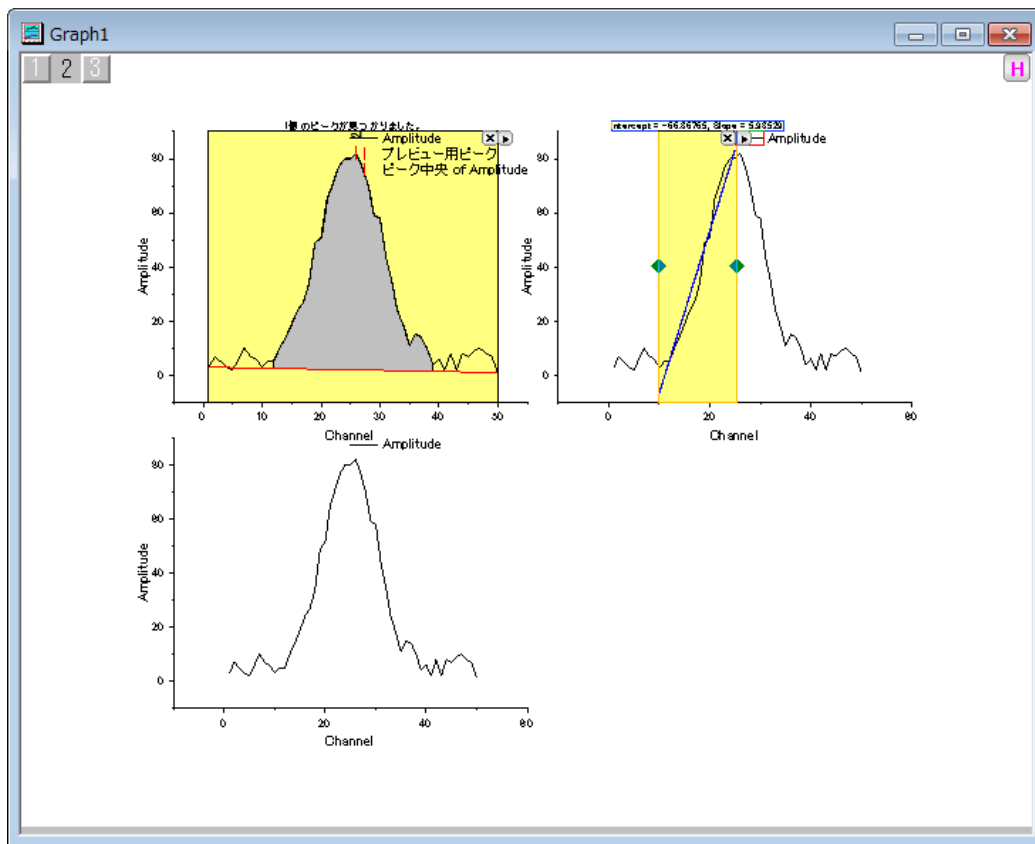



- ROI ボックスの右上角にある三角形のボタン  をクリックして、フライアウトメニューから新しい出力新しい出力を選択して基線のデータを出力します。

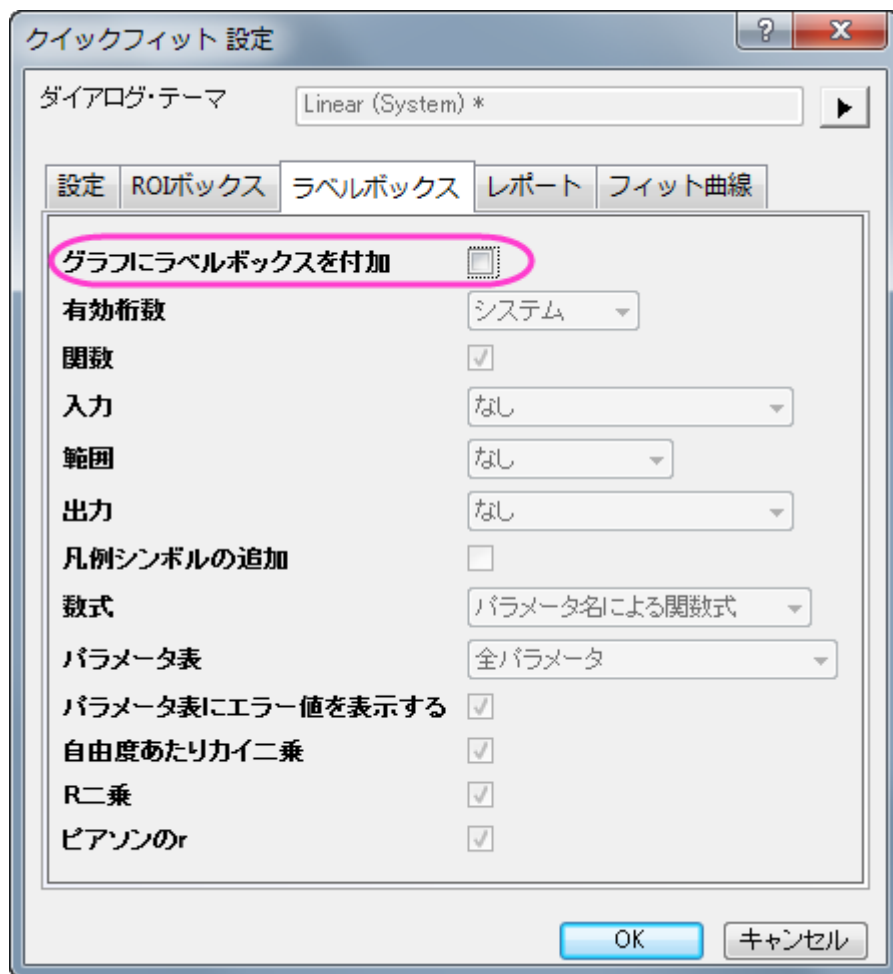


クイックフィットがジェットを使って曲線の線形フィットを探す

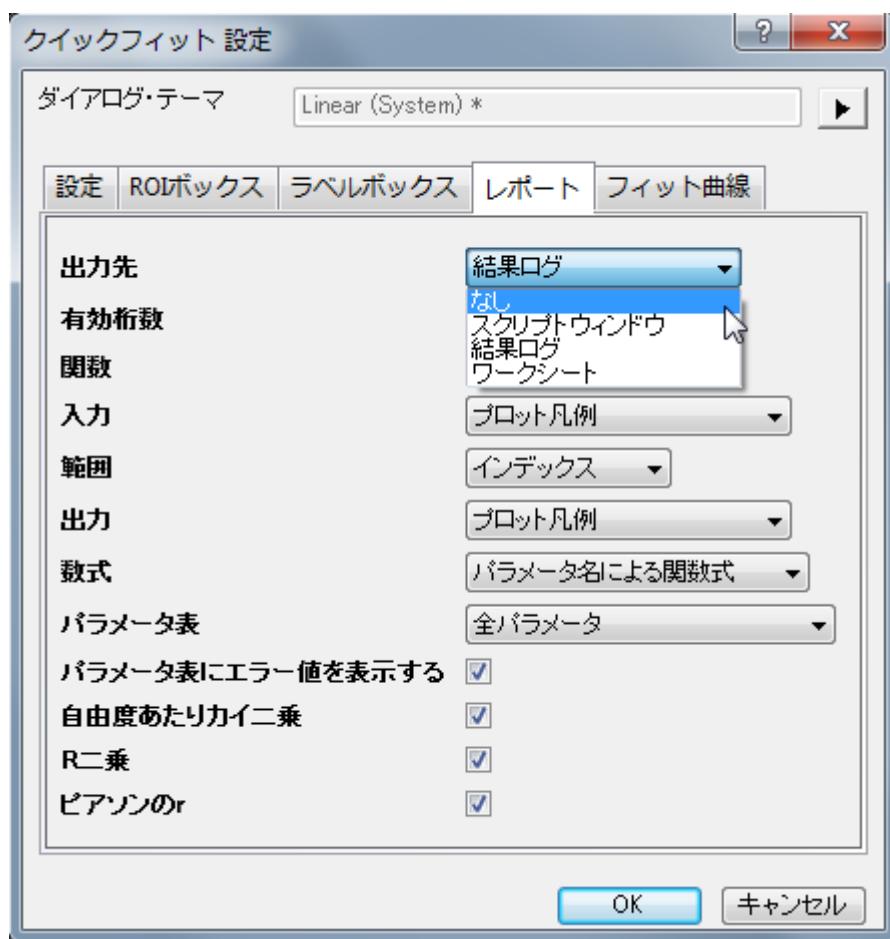
- グラフの左上にあるレイヤアイコン  をクリックしてレイヤ 2 をアクティブにするか、右上のパネルをクリックして直接アクティブにします。
- Origin のメニューから **ガジェット:クイックフィット:Linear(System)** と選択して **クイックフィット ROI** を開きます。ROI 領域の大きさを調整して、ピークの左側が入るようにします。




- ROI ボックスの右上角にある三角形のボタン  をクリックして、フライアウトメニューから設定を選択し、クイックフィット設定ダイアログを開きます。
- この線形フィットについては他の出力は必要ないのでラベルボックスタブを開き、グラフにラベルボックスを付加のチェックを外します。






5. 同じように、出力結果を出力しないようにするには、**レポート**タブを開き、**出力先**のドロップダウンから**なし**を選び、**OK**をクリックしてダイアログを閉じます。



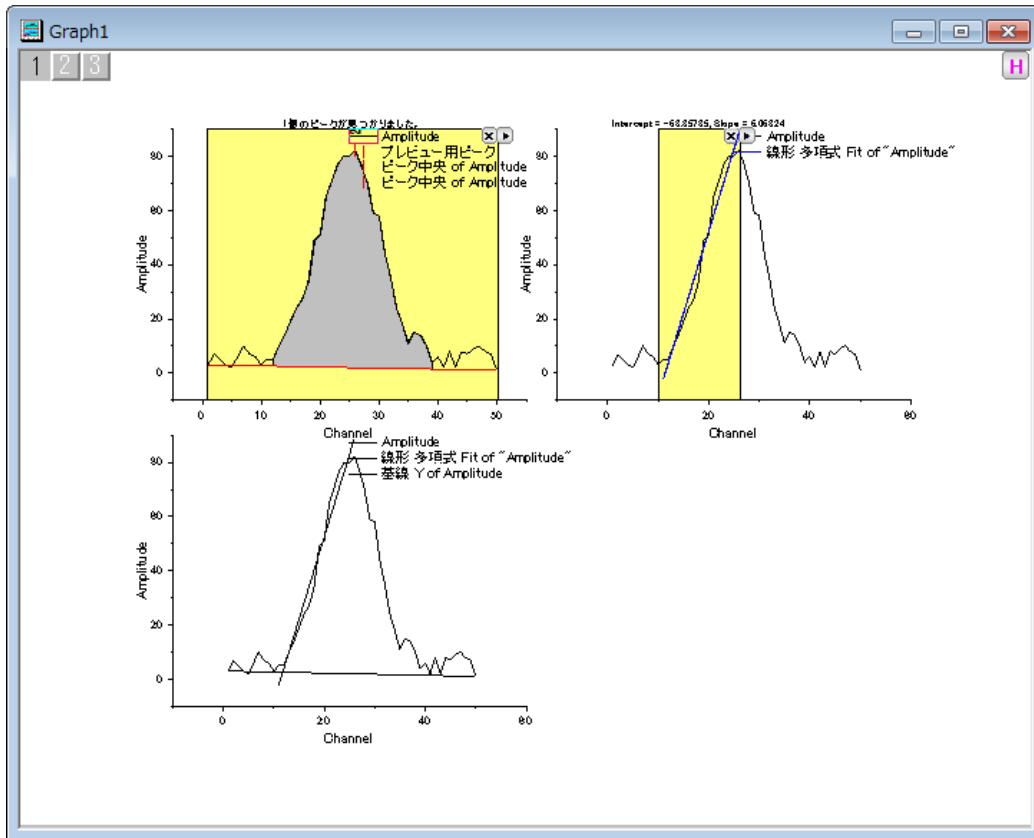
6. ROI 領域の右上にある三角ボタン  に戻ります。クリックすると開くコンテキストメニューから新しい出力を選択してワークシートにフィット結果を出力します。

交差ガジェットを使って交点を探す

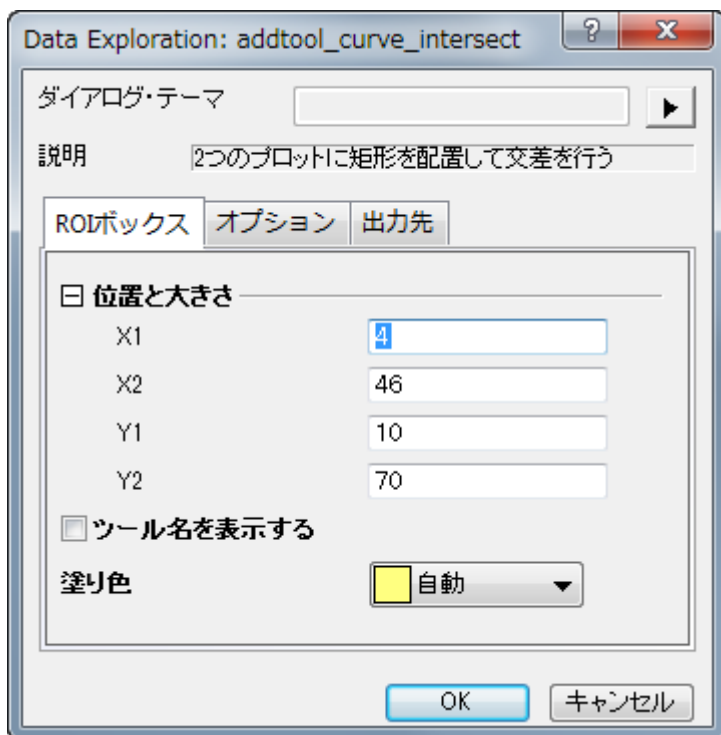
1. 交差ガジェットを実行する前に、先の 2 つのガジェットから入手したフィットした基線と直線を 3 目のプロットに追加します。左上にあるレイヤアイコン  をクリックし、レイヤ 3 をアクティブにします。レイヤアイコン  の上で右クリックし、レイヤの内容を選択してレイヤ内容-レイヤ 3 ウィンドウを開きます。左側パネルでロングネームが **QuickFit Y1** と基線 **Y of Amplitude** となっている行をそれぞれ選び、右矢印アイコン  をクリックして右側パネルに追加します。




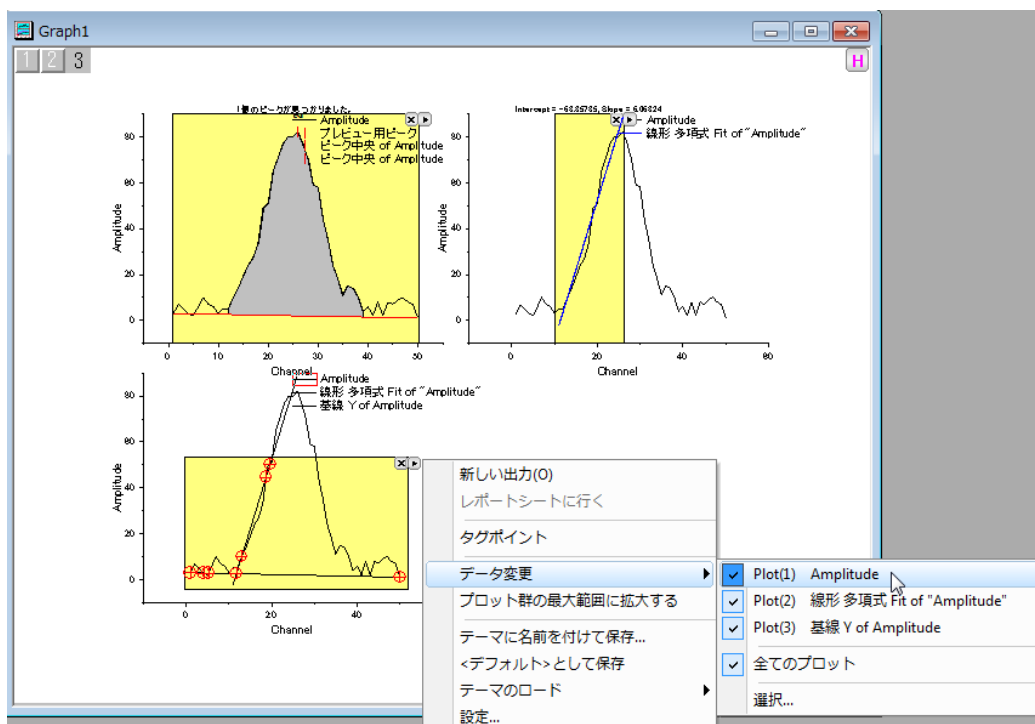
- OK をクリックしてウィンドウを閉じ、フィットした基線と折れ線が 3 目目のレイヤに表示されます。




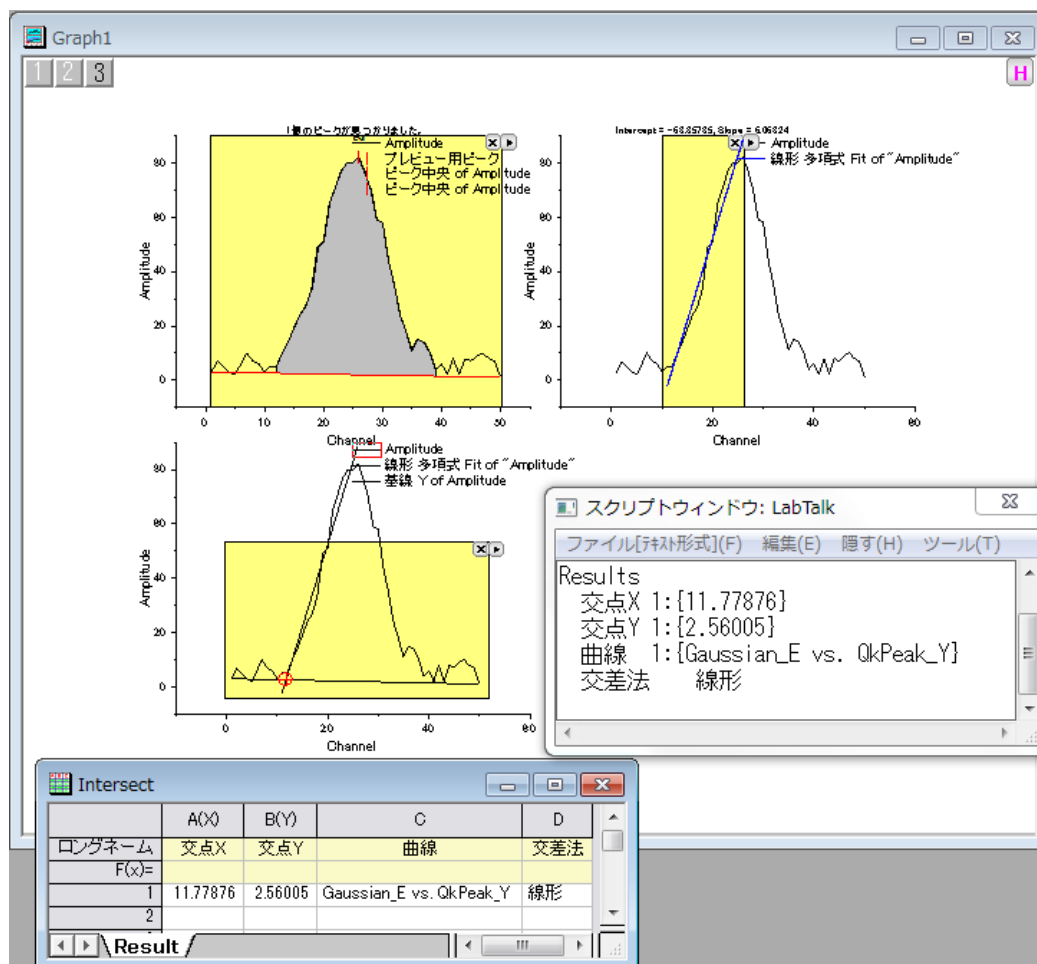
- グラフをアクティブにしてから、Origin メニューで **ガジェット: 交差** を選び、**Data Exploration: addtool_curve_intersect** ダイアログを開きます。そのまま **OK** をクリックしてダイアログを閉じると交差ガジェット ROI が表示されます。






4. ROI 領域の位置と大きさを調整して基線と直線の交点が黄色いボックス内に入るようにしてください。元の曲線との交点を除外するには、ROI 領域の右上にある三角ボタン  をクリックし、**データ変更**の中にある **Plot(1) Amplitude** のチェックを外します。

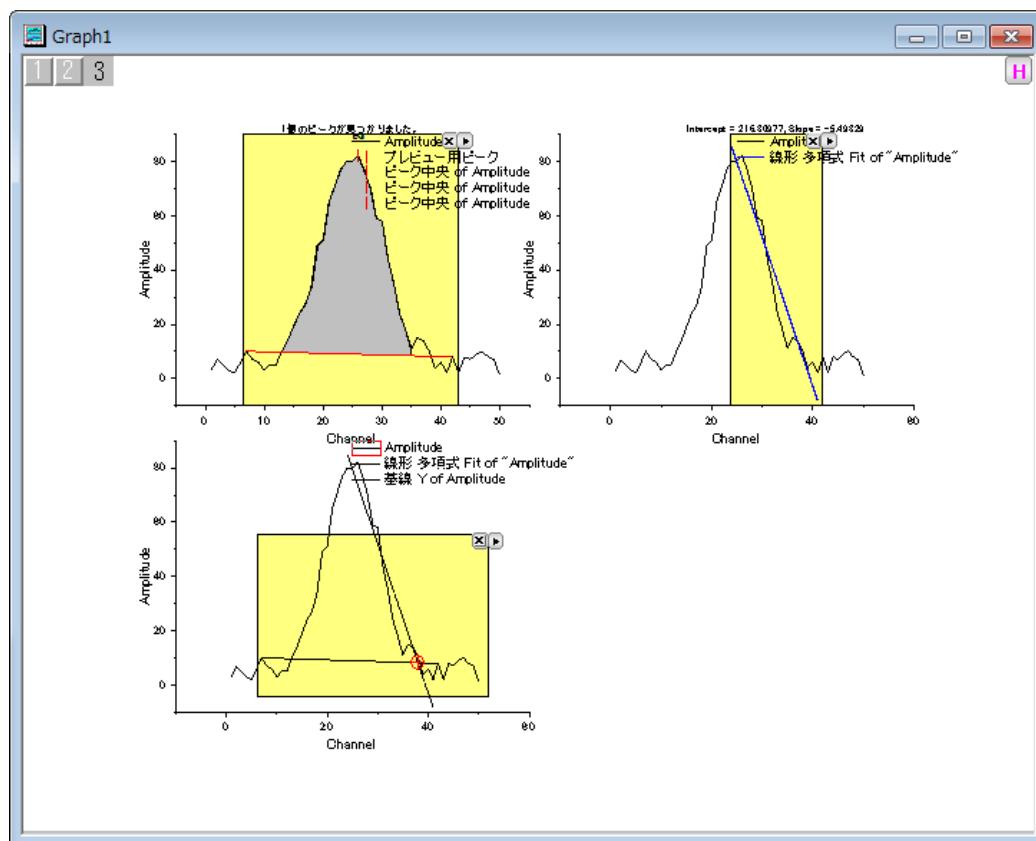


5. ROI 領域の右上にある三角ボタン  に戻ります。クリックすると開くコンテキストメニューから**新しい出力**を選択して基線と線形フィットを行った直線の交点の結果を出力します。



出力を更新する

- レイヤアイコン **1** をクリックしてレイヤ 1 をアクティブにします。**クイックピーク** ROI を移動し、新しい基線を作成します。ROI 領域の右上にある三角ボタン  をクリックします。クリックすると開くコンテキストメニューから**新しい出力**を選択してワークシートに新しい基線を出力します。
- レイヤアイコン **2** をクリックしてレイヤ 2 をアクティブにし、**クイックフィット** ROI の位置を変えます。今度は曲線の反対側に設置しましょう。ROI 領域の右上にある三角ボタン  をクリックします。クリックすると開くコンテキストメニューから**最後の出力を更新**を選択してワークシートに線形フィット結果を出力します。
- レイヤアイコン **3** をクリックしてレイヤ 3 をアクティブにします。**交差** ROI の位置を動かし、新しい基線と線形フィットをした直線の交点がボックスの中に入るようにします。ROI 領域の右上にある三角ボタン  をクリックします。クリックすると開くコンテキストメニューから**新しい出力**を選択して新しい交点の情報を出力します。



4.2. カーブフィッティング

4.2.1. 線形フィットと外れ値の除去

線形フィットと外れ値の除去

サマリー

外れ値は、通常、他のデータポイントから離れたデータポイントまたは観測ポイントであり、例えば測定時の誤りなどで発生します。外れ値の識別と除去については、さまざまな議論が行われており、データの特徴が分かっている場合、モデルを使うことが広く行われています。

学習する項目

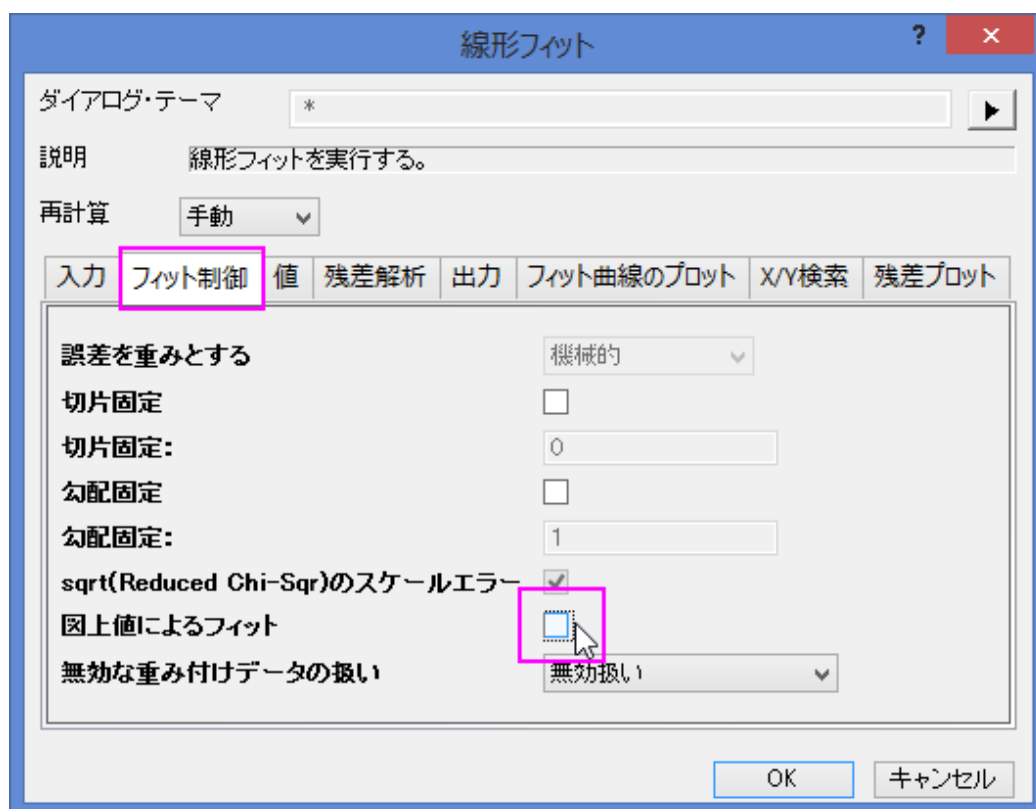
このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- 一連のデータポイントで線形回帰を実行する方法
- 出力の残差テーブルを調べ、外れ値を識別する方法
- マスクツールを使って外れ値を除去する方法
- 再計算機能を使って、外れ値を除去した後に自動的に分析結果を更新する方法

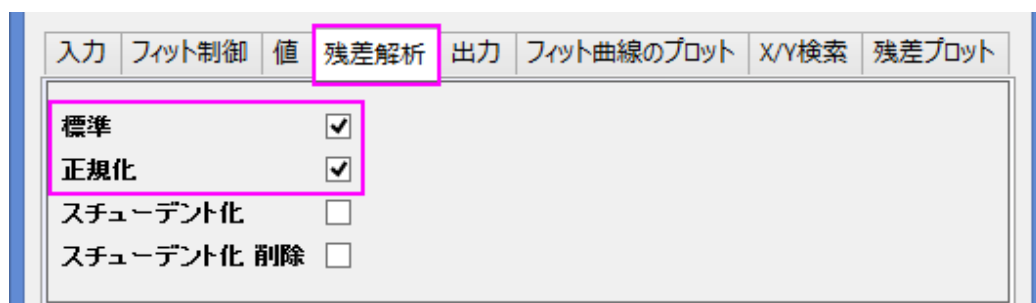
このチュートリアルで説明している手順は、多項式回帰や非線形フィットでも利用できます。

ステップ

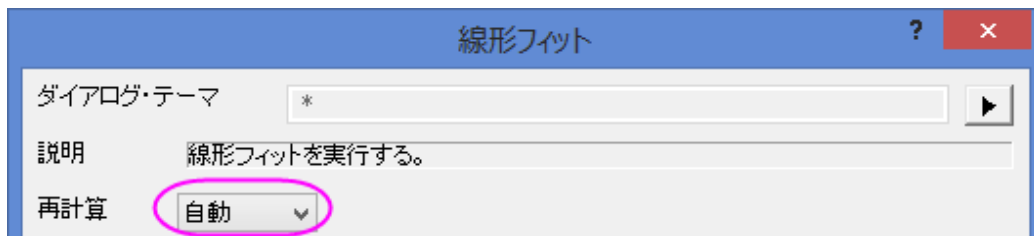
1. 新しいワークブックを開き、*Samples\Curve Fitting\Outlier.dat* ファイルを開きます。
2. 2 列目をクリックして選択した後にメニューから操作を行います。**作図:シンボル図:散布図**と操作を行い、散布図を作成します。
3. グラフをアクティブにしたうえで次の操作を行います。**解析:フィット:線形フィット**と選び、線形フィットダイアログを出します。以前に「線形フィット」ダイアログを使ったことがある場合、サブメニューが開きますので、「>>ダイアログを開く」サブメニューを選択します。
4. フィットオプションブランチで、**図上値によるフィット**のチェックを外します。



5. 『残差解析』ツリーノードを開き、『標準化』チェックボックスにチェックを付けます。



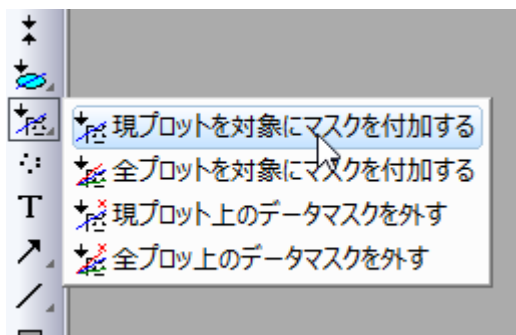
6. ダイアログの一番上にある「再計算」ドロップダウンリストを「自動」にし、ダイアログの一番下にある OK ボタンをクリックします。ダイアログが閉じ、データに線形回帰が実行されます。



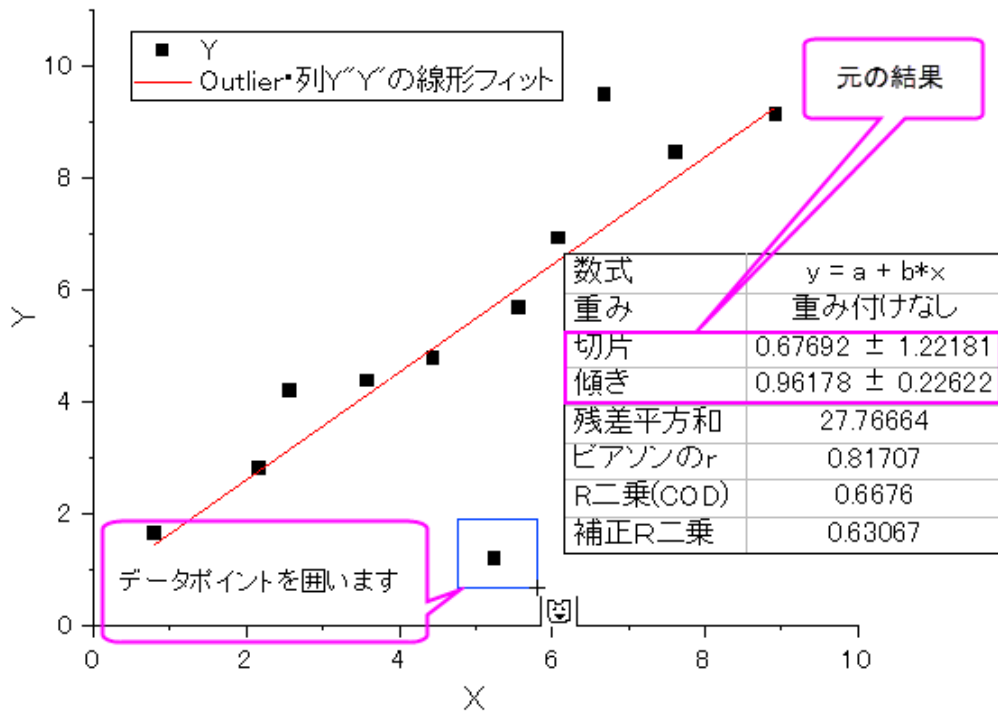
7. データワークブックの **FitLinearCurves1** 結果シートを選択し、右方向にスクロールして、「標準残差」列を表示します。この列の 6 行目の値が -2.54889 となっています。

	A(X1)	B(Y1)	C(X2)	D(Y2)	E(Y2)
ロングネーム	独立変数	Outlier・列Y'Y'の線形フ	独立変数	Outlier・列Y'Y'の標準	Outlier・列Y'Y'の標準
単位					
コメント					
パラメータ	フィット曲線のプロット				
1	0.79	1.43673	0.79	0.23327	0.13281
2	0.79813	1.44455	2.16	0.08563	0.04875
3	0.80626	1.45236	2.56	1.08092	0.61539
4	0.81438	1.46018	3.57	0.28951	0.16483
5	0.82251	1.468	4.43	-0.14762	-0.08404
6	0.83064	1.47582	5.23	-4.47705	-2.54889
7	0.83877	1.48363	5.55	-0.31482	-0.17923
8	0.8469	1.49145	6.06	0.44467	0.25316
9	0.85503	1.49927	6.67	2.41798	1.37662
10	0.86315	1.50709	7.61	0.48391	0.2755

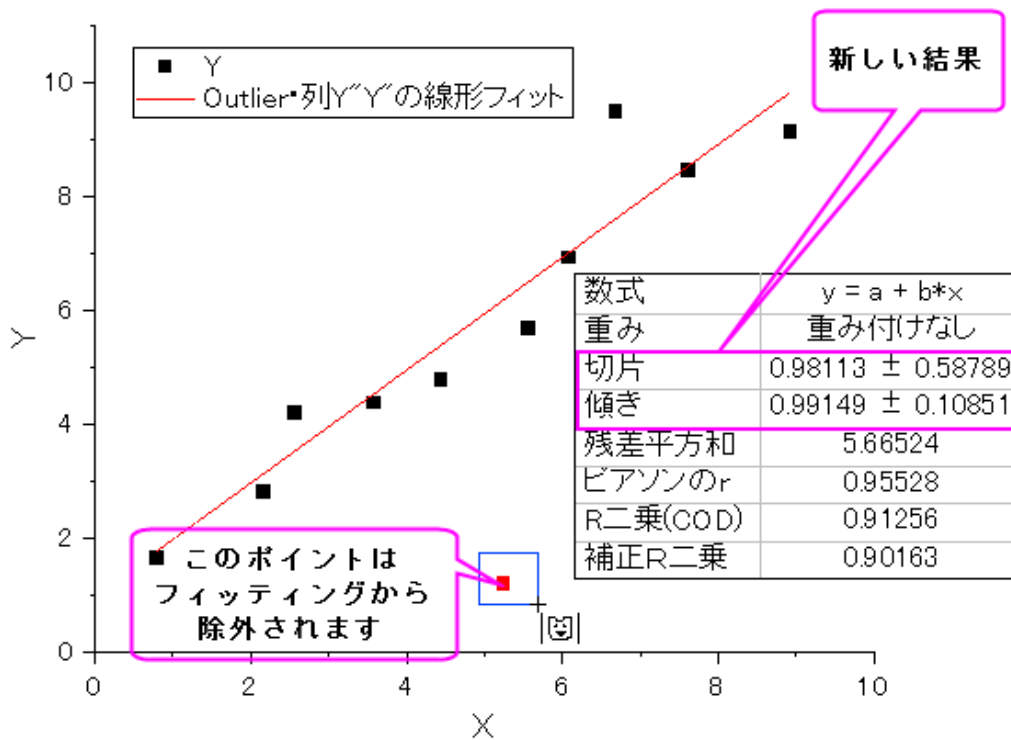
8. グラフをアクティブにして、「プロット操作・オブジェクト作成」ツールバーの「領域マスクツール」のボタンをマウスで数秒押します。フライアウトメニューの最初の項目「現プロットを対象にマスクを付加する」サブメニューを選択します。



9. 上記のサブメニューを使って、グラフの 6 番目のデータポイントをクリックして、マスクします。



これにより線形フィットでの入力データが変わり、自動更新機能が働きます。このマスクしたデータを除外して線形フィットが再度実行されます。グラフ内のフィット曲線と貼り付けたパラメータが自動的に更新されます。結果のグラフは次のようになります。





動力学モデルのための線形フィット

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 Langmuir モデルのための線形フィット](#)
 - [3.1 変換した独立変数と従属変数を識別する](#)
 - [3.2 新しい独立変数と従属変数のデータを作成する](#)
 - [3.3 変換した線形データに線形フィットを行う](#)
 - [3.4 元の非線形データに図上値による線形フィットを行う](#)
- [4 その他の非線形動力学モデルへの提案](#)
 - [4.1 Freundlich 関数式](#)
 - [4.2 Lagergren の擬一次式](#)
 - [4.3 Ho の擬二次式](#)

サマリー

非線形動力学モデル(kinetic model)は自然科学、例えば物理、化学、生物など、幅広い分野で使われています。実験的には、動力学モデルの重要なパラメータは素データをフィットすることにより入手されています。素データを直感的にフィットする方法は、動力学方程式(kinetic equation)から直接数式を導き出して非線形フィットを行うことです。あるいは、従属変数が独立変数に線形の関係に関連を持つように方程式を変換すれば、線形フィットを行うこともできます。

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- 同じ非線形動力学モデルを異なる方法で線形に変形し、それぞれ線形フィットを行う
- 非線形動力学モデルに明らかな線形フィットを行う

Langmuir モデルのための線形フィット

変換した独立変数と従属変数を識別する

Langmuir モデルは以下の非線形方程式で説明されます。

$$y = \frac{ym * K * x}{1 + K * x}$$

ここで、 ym と K はフィットを通じて入手したいパラメータです。

Langmuir モデルに線形フィットを行うには、以下の 2 つの方法のうちどちらかで線形に変換します。

1. 伝統的な線形 Langmuir 方程式に変換する

$$y = -\frac{1}{K} \frac{y}{x} + ym$$


ここで、独立変数は y/x 、従属変数は y 、傾きは $-1/K$ 、切片は ym を表します。

2. 両辺逆数型線形 Langmuir 方程式に変換する

$$\frac{1}{y} = \frac{1}{ym * K} \frac{1}{x} + \frac{1}{ym}$$

ここで、独立変数は $1/x$ 、従属変数は $1/y$ 、傾きは $1/(ym*K)$ 、切片は $1/ym$ を表します。

新しい独立変数と従属変数のデータを作成する

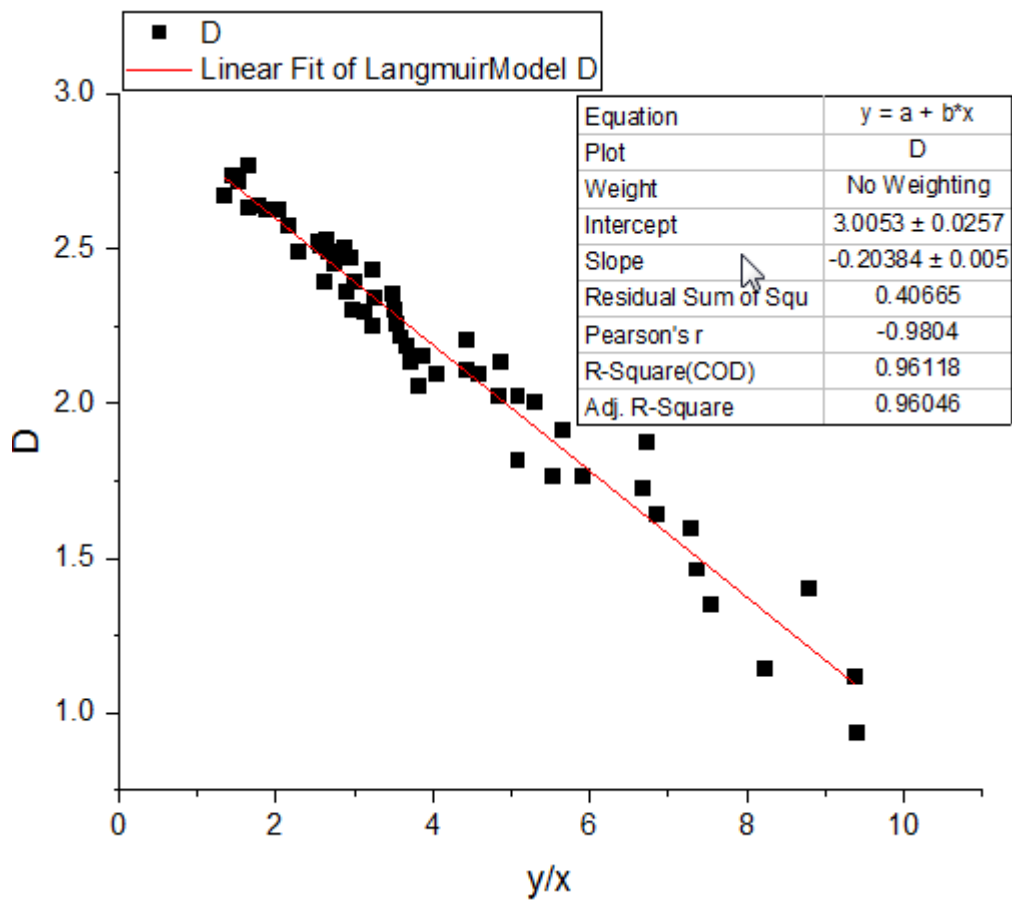
1. ワークブックを新しく作成します。
2. 単一 ASCII ファイルインポートボタン  をクリックし、「ASCII」ダイアログボックスを開きます。Samples\Curve Fitting フォルダに移動し、LangmuirModel.dat ファイルを開きます。オプションダイアログを表示するにチェックを付けて OK を押すことで **impASC** ダイアログが表示されます。インポートオプションノードのスパークラインの追加でしないを選択して OK をクリックします。
3. Ctrl+D を押して新規列の追加ダイアログを表示します。テキストボックスに 4 を入力して OK を押し、4 つの列を追加します。これらは後から XY 属性に設定します。
4. 伝統的な線形 Langmuir モデルに変換するには、独立変数は y/x になりますが、従属変数は y のままです。列 C と D のロングネームにそれぞれ y/x と y を入力します。これで、グラフの中で X 軸と Y 軸のタイトルにとして表示できます。
5. 列 C の **F(x)** 関数セルに「Col(B)/Col(A)」と入力して独立変数 y/x を計算して入力するように設定し、Enter キーを押します。列 C を選択し、右クリックして表示されるコンテキストメニューから **列 XY 属性の設定: X 列** と操作して列 D に対する X になるようにします。
6. 列 D の **F(x)** 関数セルに「Col(B)」と入力して従属変数 y の値を入力するように設定し、Enter キーを押します。
7. 両辺逆数型線形 Langmuir モデルに変換するには、独立変数は $1/x$ に、従属変数は $1/y$ になります。先ほどの列 C と D のように、列 E と F を設定します。ロングネームには $1/x$ と $1/y$ をそれぞれ入力し、F(x)関数セルには $1/Col(A)$ と $1/Col(B)$ を入力しましょう。列 E の列 XY 属性の設定は X に変更します。

8. ワークシートは下図のようになります。

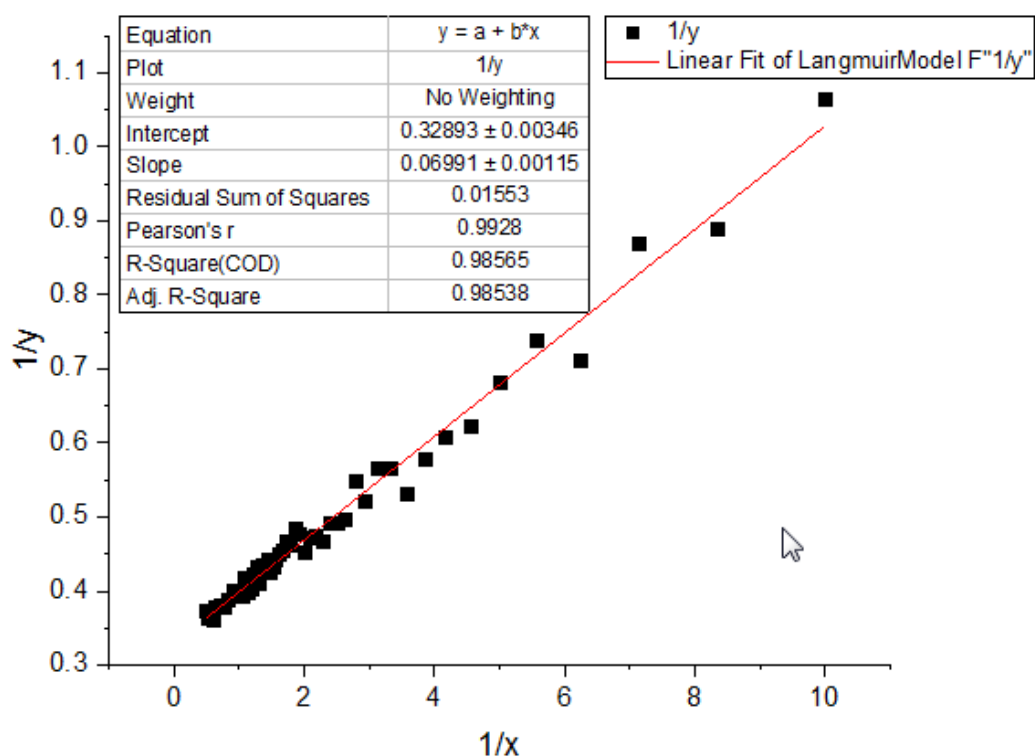
	A(X1)	B(Y1)	C(X2)	D(Y2)	E(X3)	F(Y3)
ロングネーム	x	y	y/x	y	1/x	1/y
単位						
コメント						
F(x)=			Co(B)/Co(A)	Co(B)	1/Co(A)	1/Co(B)
1	0.1	0.93919	9.39192	0.93919	10	1.06474
2	0.12	1.12371	9.36425	1.12371	8.33333	0.88991
3	0.14	1.14885	8.20608	1.14885	7.14286	0.87044
4	0.16	1.40556	8.78476	1.40556	6.25	0.71146
5	0.18	1.35436	7.5242	1.35436	5.55556	0.73836
6	0.2	1.46774	7.33868	1.46774	5	0.68132
7	0.22	1.60306	7.28662	1.60306	4.54545	0.62381
8	0.24	1.64389	6.84954	1.64389	4.16667	0.60831
9	0.26	1.73117	6.65836	1.73117	3.84615	0.57764
10	0.28	1.88119	6.71852	1.88119	3.57143	0.53158
11	0.3	1.76906	5.89686	1.76906	3.33333	0.56527

変換した線形データに線形フィットを行う

- まず、伝統的な線形 Langmuir 変換に線形フィットを行います。Highlight column *D* and select **Plot:Symbol:Scatter** to make a scatter plot.
- 作図した散布図に線形フィットを行うには、**解析:フィット:線形フィット**と操作してダイアログを開きます。**線形フィット**ダイアログで全ての設定はデフォルトのまま **OK** ボタンをクリックしてフィットします。表示されるポップアップではいいえを選択してから **OK** ボタンをクリックします。



3. 同じように、両辺逆数型線形 Langmuir 変換でも線形フィットを行います。列 F を選択し、上記 1 番と 2 番の手順を繰り返し、散布図を作成してからフィットを行ってください。

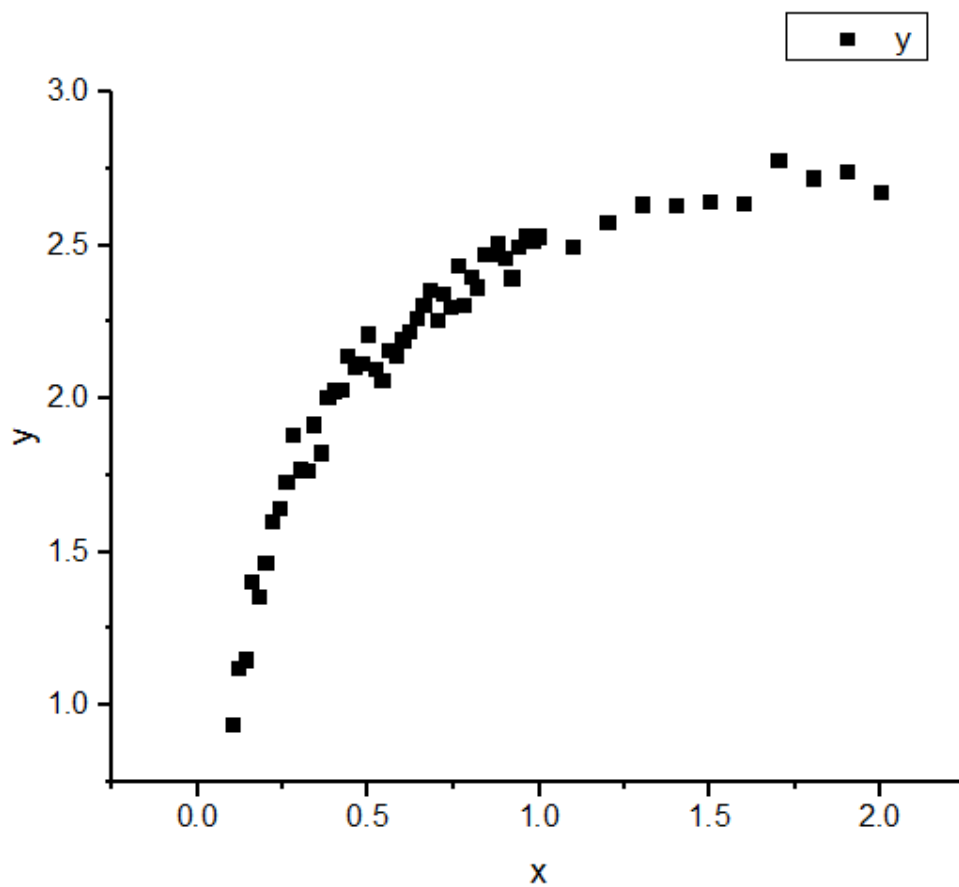


Langmuir モデルの係数はそれぞれの傾きと切片の式から計算することができます。

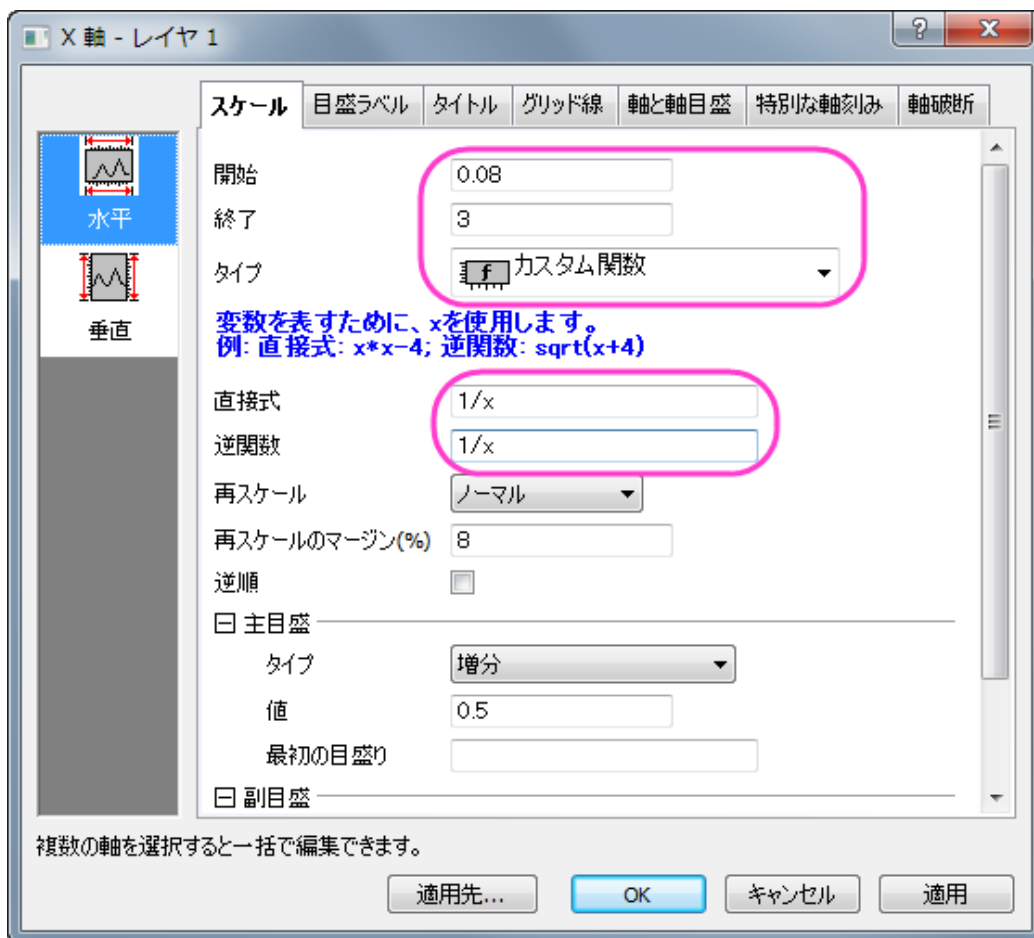
元の非線形データに図上値による線形フィットを行う

あるいは、見かけとして線形に表示しているデータに見かけによる(データの見え方による線形フィットを実行します)。Langmuir 動力学モデルを見ると、両辺逆数型 Langmuir 線形変換から、元の従属変数の逆数 ($1/y$) と元の独立変数の逆数 ($1/x$) は線形関係にあるといえます。よって、X のスケールを $1/x$ に設定し、Y のスケールを $1/y$ に設定すれば、素データの Langmuir 運動データは線形に表示されます。

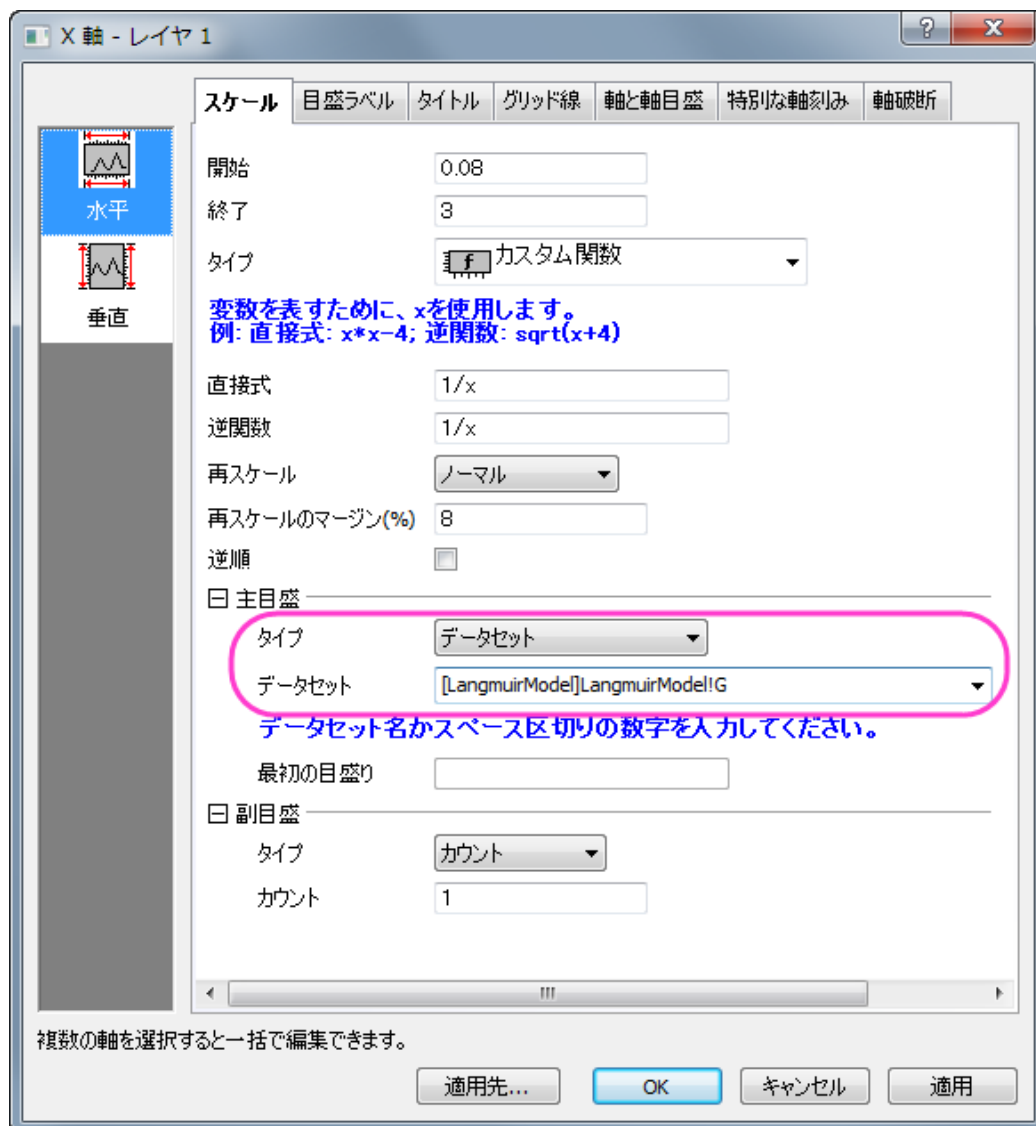
1. 図上値による線形フィットを Langmuir モデルの素データで行うには、列 B を選択し、**作図: シンボル図: 散布図**と操作して非線形の散布図を作図します。



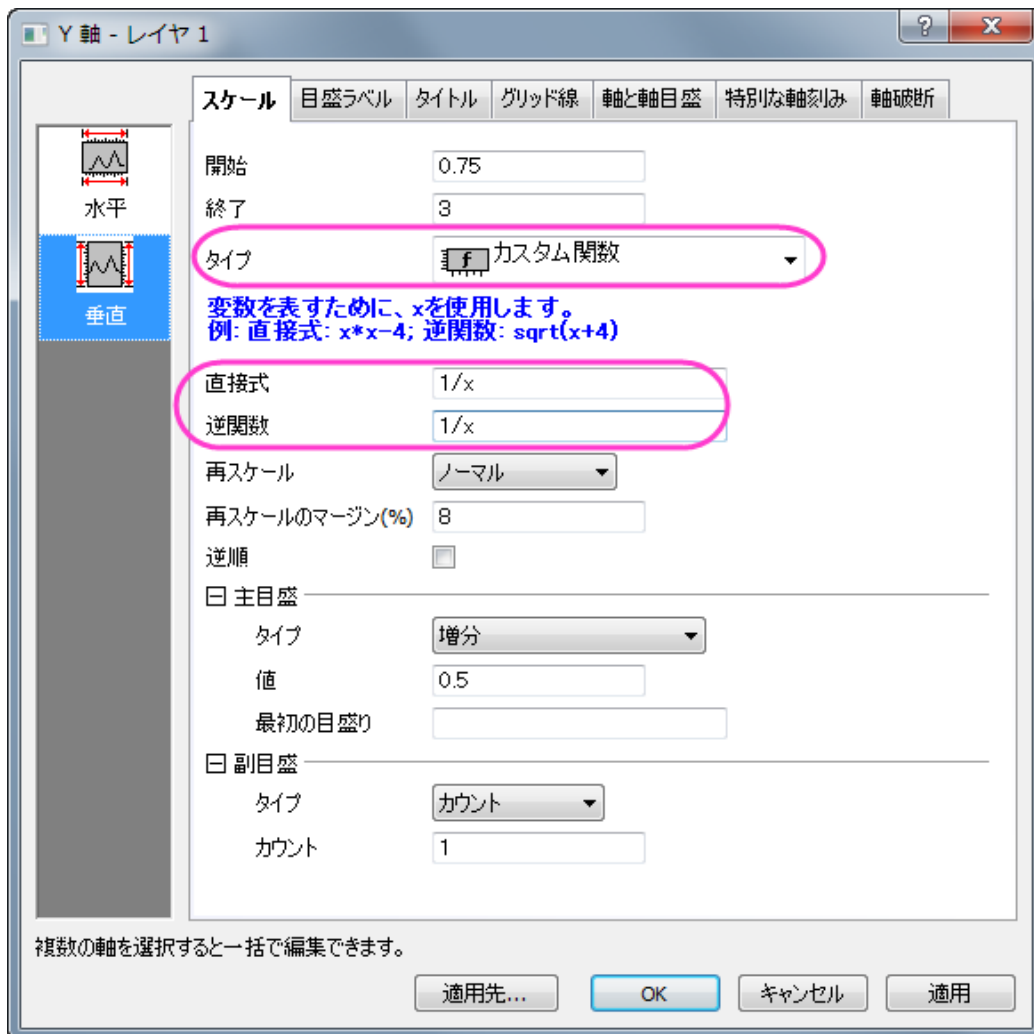
2. X軸をダブルクリックして、軸ダイアログを開き、開始に 0.08、終了に 3を設定します。タイプ
- のドロップダウンリストからカスタム関数を選択し、直接式に $1/x$ を、逆関数に $1/x$ を設定します。再スケールのドロップダウンリストから開始を固定を選択します。OK をクリックしてダイアログを閉じます。



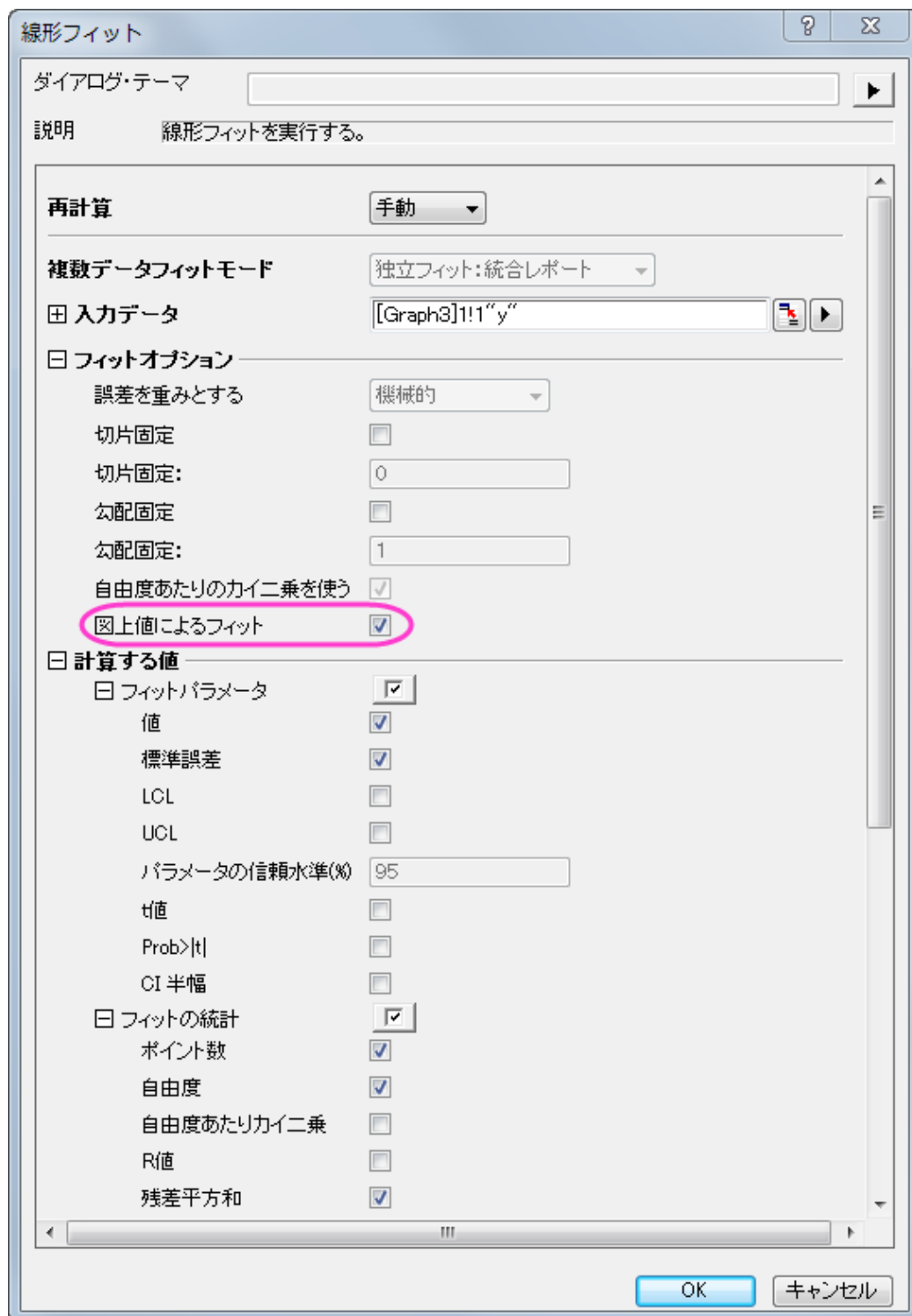
3. 作図したプロットから分かるように、デフォルトの X 軸の目盛は適切な間隔が開いていません。X 軸の目盛を分かりやすくするため、データセットの目盛りの位置を指定しましょう。LangmuirModel ワークシートをアクティブにし、Ctrl + D で列を追加するダイアログを表示し、1 つ列を追加します。新しく追加された列 G に 0.1, 0.15, 0.2, 0.3, 0.4, 0.7, 1.3 のデータを入力します。
4. 列 G を主目盛の位置として使用するには、X 軸をダブルクリックして軸ダイアログを開きます。スケールタブの主目盛ノードのタイプでデータセットを選択し、表示されるデータセットドロップダウンリストで「[LangmuirModel]LangmuirModel!!G」を選択します。



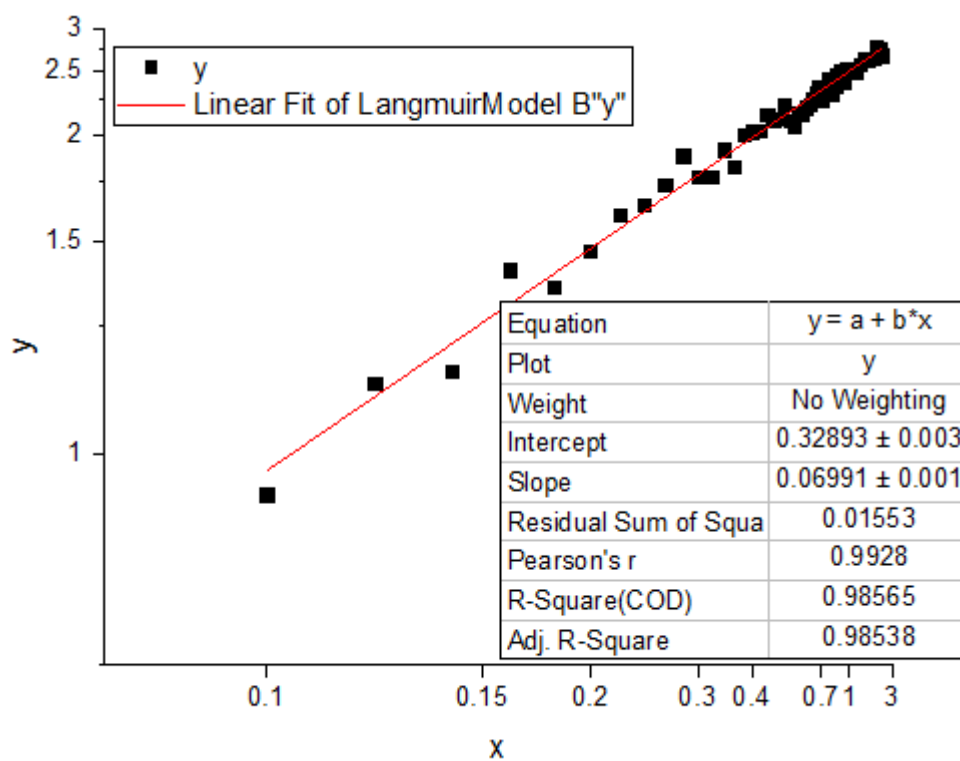
5. 左側パネルで垂直をクリックし、先ほどと同じようにタイプでカスタム関数を選択します。表示される直接式と逆関数には $1/x$ を入力します。OK をクリックして、ダイアログを閉じます。



6. 図上値による線形フィットを実行するには、**解析:フィット:線形フィット**と操作して**線形フィット**ダイアログを開きます。デフォルトで**図上値による線形フィット**が選択されていることが分かります。



7. **OK** をクリックしてダイアログを閉じ、ポップアップするダイアログではいいえを選択してから **OK** をクリックします。



その他の非線形動力学モデルへの提案

Freudlich 数式

Freudlich モデルの非線形動力学モデルの式は、以下のようになります。

$$\ln(y) = \ln(K) + \frac{\ln(x)}{n}$$

ここで、独立変数は $\ln(x)$ 、従属変数は $\ln(y)$ 、傾きは $1/n$ で交点は $\ln(K)$ になります。なお、 K と n は求めるべき係数です。

この場合、自然対数 \ln スケールは組み込まれているので、図上値による線形フィットがお勧めです。この非線形動力学モデルをフィットするには、 X と Y 軸のスケールがどちらも \ln スケールに設定されている状態で図上値によるフィットを行う必要があります。

あるいは、 X と Y のデータセットに対して \ln の値をけいさんしてから線形フィットを行うことができます。詳細は Langmuir モデルを確認してください。

Lagergren の擬一次式

Lagergren の擬一次式モデルの非線形動力学モデルの式は、以下のようになります。

$$\log(q_{e,exp} - y) = \frac{\log(q_{e,fit}) - k_1 \cdot x}{2.303}$$

ここで、独立変数は x 、従属変数は $\log(q_{e,exp} - y)$ 、傾きは $-k_1/2.303$ 、切片は $\log(q_{e,fit})/2.303$ となります。 $q_{e,exp}$ は既知の定数で、 $-k_1$ と $q_{e,fit}$ は求められる係数です。

この場合、Log スケールは組み込まれているので、図上値による線形フィットがお勧めです。この非線形な動力学モデルをフィットするには、 $\frac{x}{q_{e,exp} - y}$ を計算してから Y 軸だけを Log スケールに設定して図上値にフィットを使用してフィットします。

あるいは、まず $\text{Log}(q_{e,exp} - y)$ を計算し、作成したこのデータを使って直接線形フィットを行います。詳細は Langmuir モデルを確認してください。

Ho の擬二次式

Freudlich モデルの非線形動力学モデルの式は、以下のようになります。

$$\frac{x}{y} = \frac{1}{k_2 q_e^2} + \frac{x}{q_e}$$

ここで、独立変数は x、従属変数は x/y、傾きは $1/q_e$ 、切片は $1/(k_2 q_e^2)$ となります。 k_2 は既知の定数で、 q_e は求められる係数です。

このモデルをフィットするには、まず x/y を計算し、そのデータを使用して線形フィットを行ってください。

あるいは、この計算式を以下のような形に変形させます。

$$\frac{1}{y} = \frac{1}{k_2 q_e^2} \frac{1}{x} + \frac{1}{q_e}$$

ここで、独立変数は $1/x$ 、従属変数は $1/y$ 、傾きは $1/(k_2 q_e^2)$ 、切片は $1/q_e$ を表します。

この変換をしてから新しい独立変数を $1/x$ として設定し、従属ライセンスを $1/y$ として設定してから線形フィットを行う方法と、図上値による線形フィットを X と Y 軸のスケールを $1/x$ に設定して行います。詳細は、Langmuir モデルを参照して下さい。

4.2.2. 非線形フィット

チュートリアル: 非線形曲線フィット

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 組込関数を使ってデータにフィットする](#)
- [4 ユーザ定義関数を定義する](#)

サマリー

Origin で非線形フィットを行うには、非線形フィット(NL フィット)ダイアログボックスを使用します。NL フィットツールは 200 以上の組込関数があります。



NL フィットダイアログを開かずフィットする場合は、クイックフィットツールをお試しください。

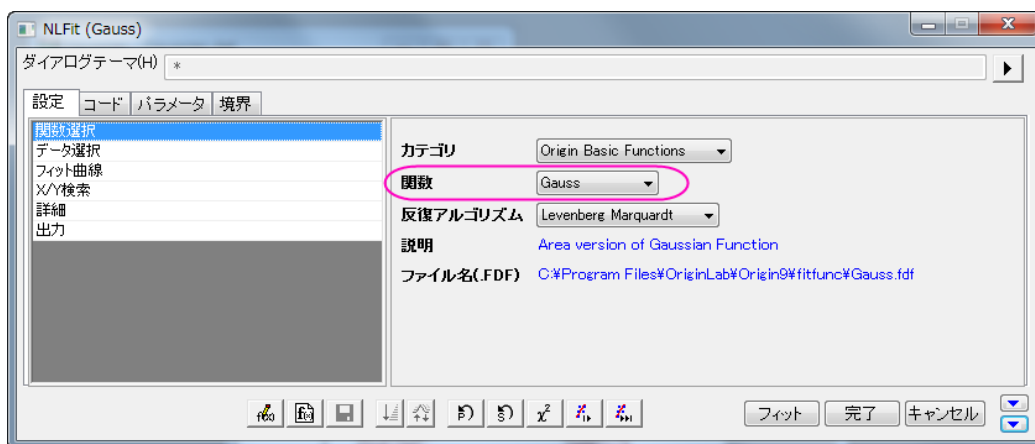
必要な Origin のバージョン: Origin 8.5

学習する項目

- 組込関数でフィットするには
- 再計算して NL フィットの設定を変更するには
- ユーザ定義関数を定義するには

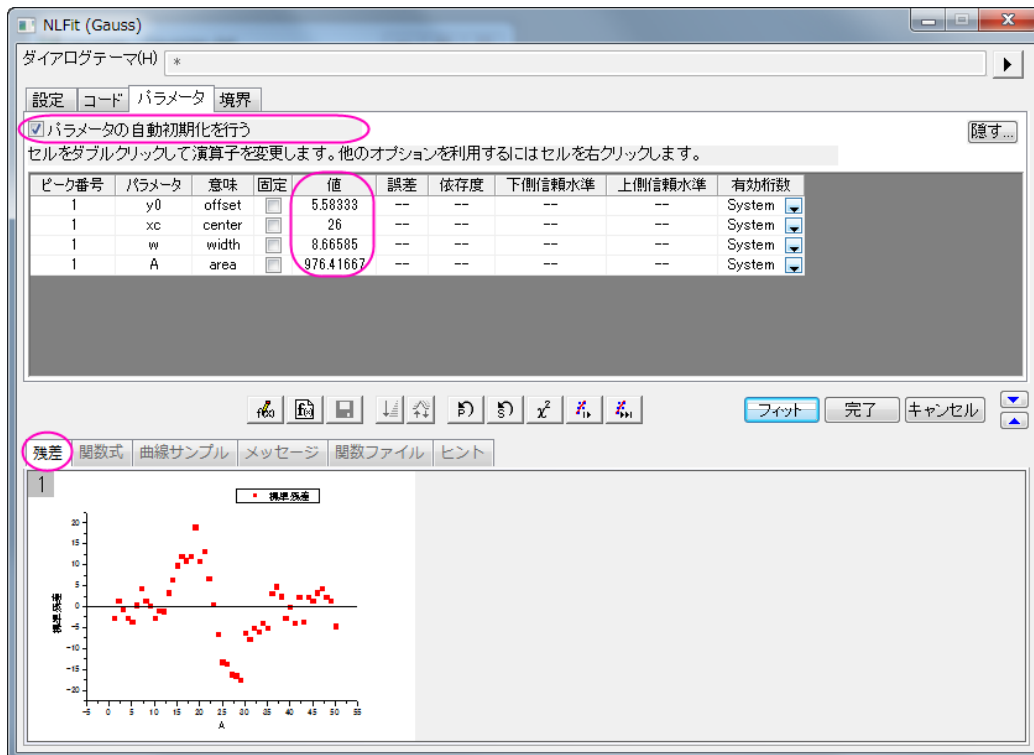
組込関数を使ってデータにフィットするには

1. **ファイル:開く...**をクリックして\\Samples\\Curve Fitting フォルダから、Intro_to_Nonlinear Curve Fit Tool.opj を開き、プロジェクトエクスプローラウィンドウで**組込関数**を選びます。
2. **Graph1** をアクティブにして、**解析: 非線形曲線フィット**を選び、**NLFit** ダイアログを開きます。**関数**のドロップダウンリストから **Gauss** を選択します。

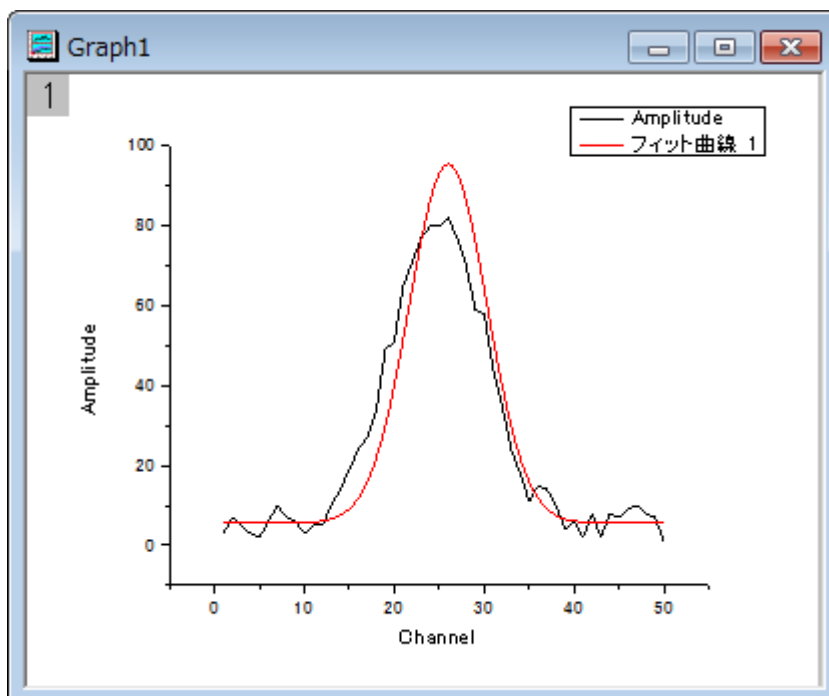



3. 組み込み関数にはパラメータの自動初期化コードが組み込まれているので、**パラメータ**タブには、初期値があらかじめ入力されています。

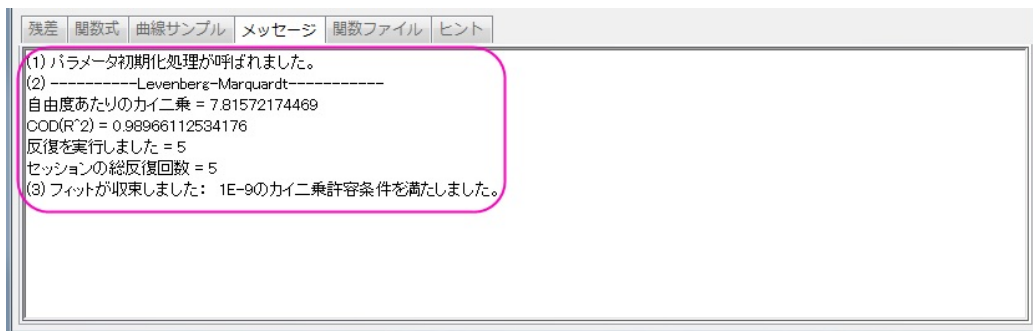
残差タブでは、現在の残差を確認できます。この図から現在のフィットがうまくいっているかどうかを確認できます。



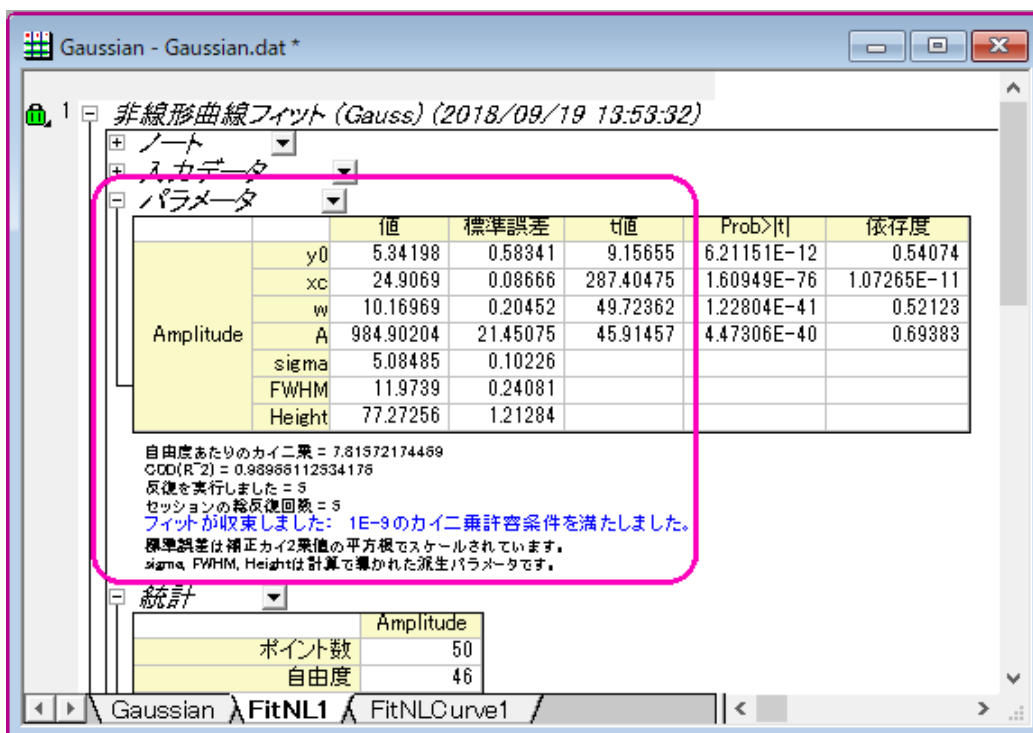
4. パラメータの初期値で作成されたフィット曲線がグラフに表示されます。



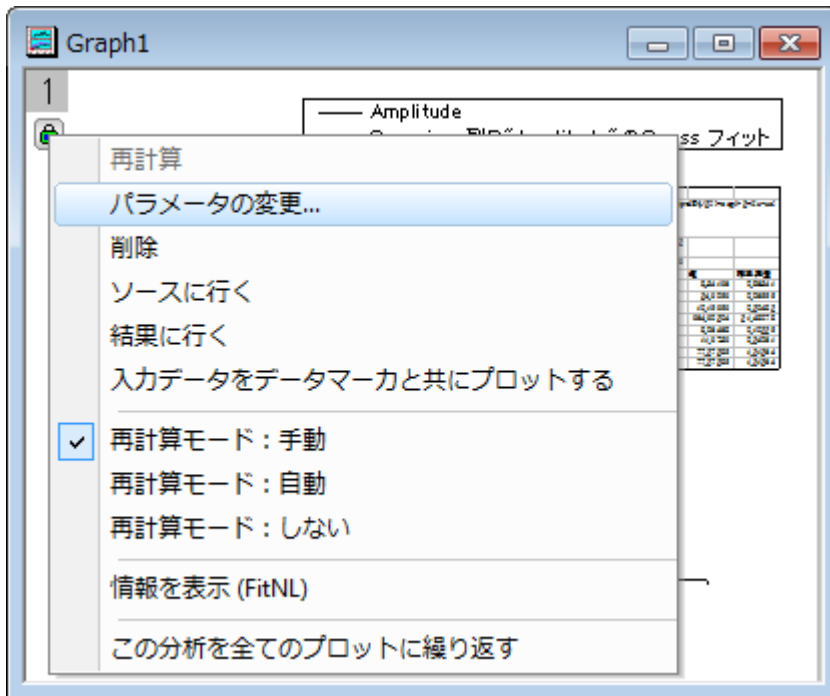
5. 収束までフィットボタン  をクリックすると、メッセージタブには反復回数、自由度あたりのカイ二乗、R 二乗値が表示されます。



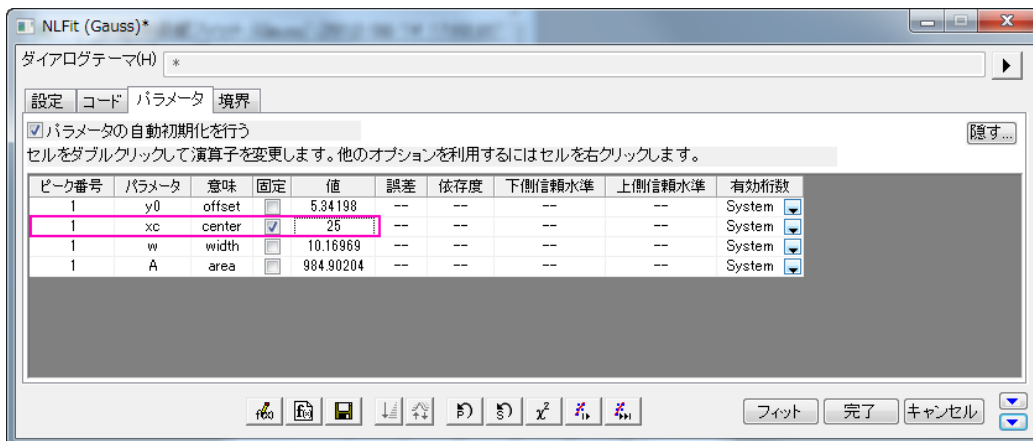
6. OK ボタンをクリックします。パラメータ値やフィット統計を表示した **FitNL1** レポートを作成します。



7. 非線形曲線フィットダイアログを再度開きます。グラフの左上の角にある緑の錠前アイコンをクリックして、**パラメータの変更**を選択し、ダイアログボックスを開きます。



8. **パラメータ**タブを開き、xc 値に 25 (セルをダブルクリックして編集します) **固定**にチェックを入れます。



9. 収束までフィットボタン  をクリックして **OK** ボタンを押します。

10. レポートシートでは、パラメータが固定されたので、xc の誤差値は xc が 25 から 0 になったことがわかります。

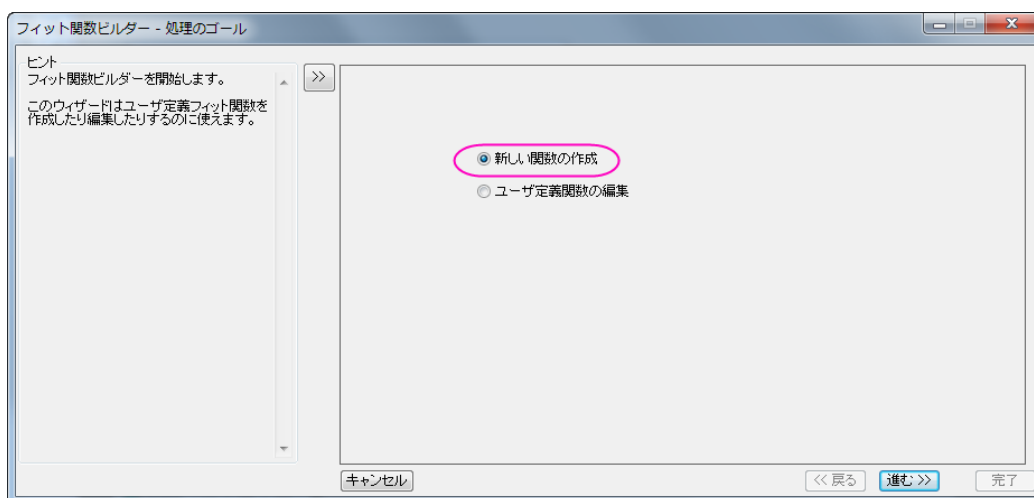
	値	標準誤差
y0	5.34629	0.58432
xc	25	0
w	10.16855	0.20486
A	984.68626	21.48327
σ	5.08427	0.10243
FWHM	11.97255	0.24121
高さ	77.26433	1.21488
h	77.26433	1.21488

自由度あたりのカイ二乗 = 7.84134711285
 QD(R²) = 0.98940173226649
 反復を実行しました = 2
 セッションの総反復回数 = 2
 フィットが収束しました: 1E-9のカイ二乗許容条件を満たしました。
 パラメータに値が固定されたものがあります
 sigma, FWHM, Height, hは計算で導かれた派生パラメータです。

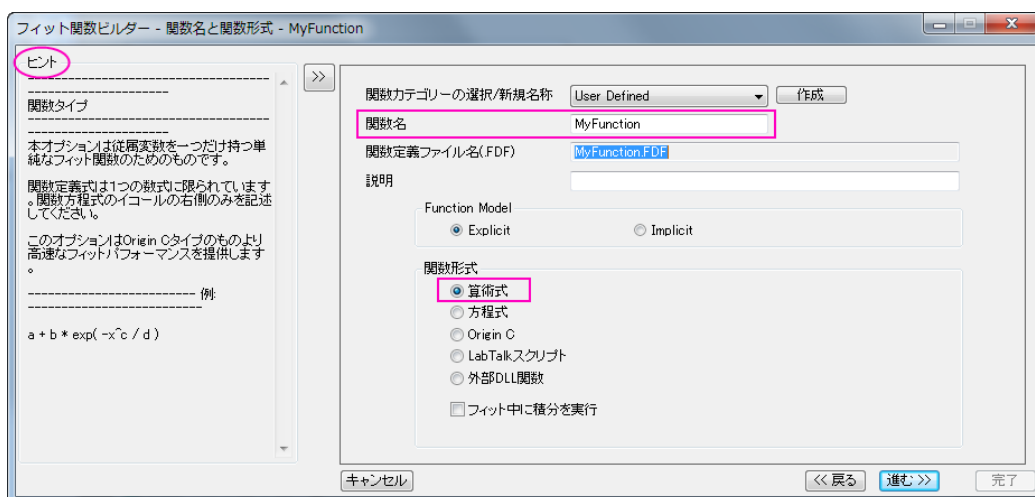
ユーザ定義関数を定義する

このセクションでは、フィット関数、 $y=y_0+a*\exp(-b*x)$ を定義し、その関数を使ったフィットを行います。

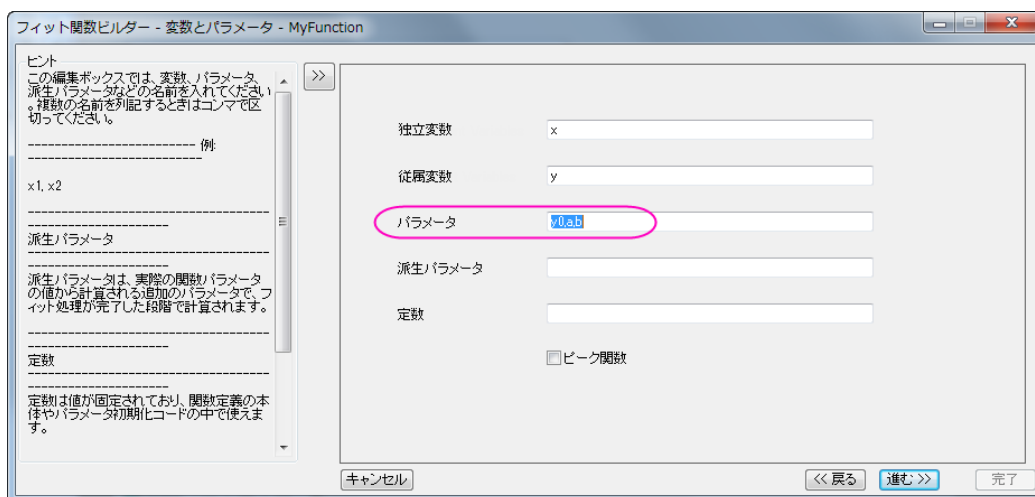
1. プロジェクトエクスプローラを開きます。メニューのツール: フィット関数ビルダ...を選び、フィット関数ビルダダイアログを開きます。
2. 処理のゴールページで新しい関数の作成をクリックして、進むボタンをクリックして関数名と関数形式のページを開きます。




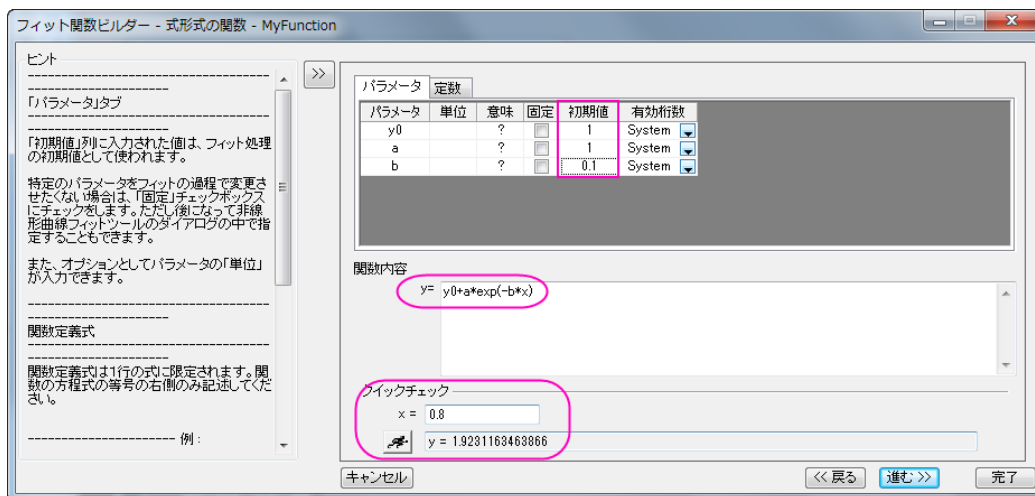
- 関数名と関数形式ページでは関数の名前と関数の種類を選択します。この関数はデフォルトでは **User Defined** のカテゴリになります。
 - 関数名を **MyFunction** と設定します。
 - 関数形式リストから**算術式**を選びます。ヒントは左側のパネルで見ることができます。
 - 進むをクリックし、**変数とパラメータ**ページに移動します。



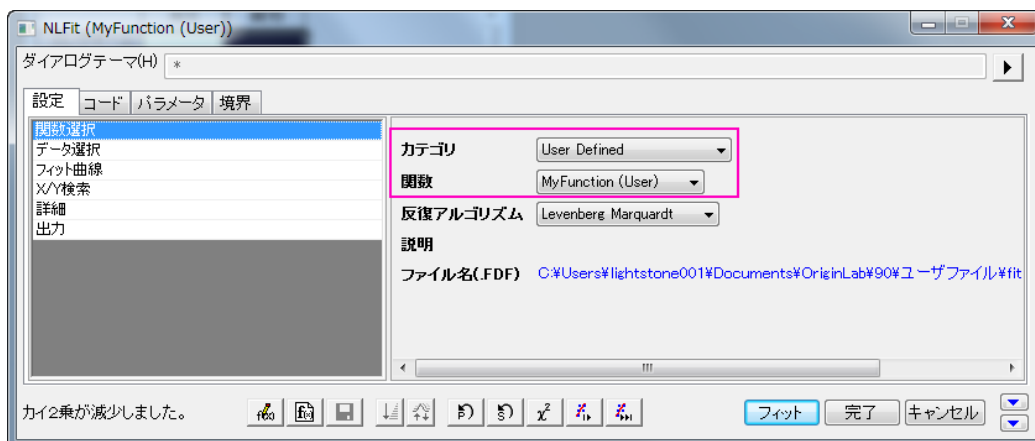
- 変数とパラメータ**ページでは、**独立変数**に x 、**従属変数**に y が設定されている事を確認してください。パラメータのテキストボックスに y_0, a, b と入力します。**進む**ボタンをクリックします。



- 式形式の関数**ページで、次の操作をします。
 - パラメータの**初期値**を設定します。
 - 関数内容の編集ボックスには $y_0+a*exp(-b*x)$ と入力します。
 - 関数の有効性をチェックするために、**クイックチェック**を使用してください。独立変数 x に値の入力したら、**評価**ボタン  をクリックして、従属変数 y を推定して関数の正当性を評価します。



- 完了ボタンをクリックして定義を修了します。
- プロジェクトエクスプローラを開き(表示: プロジェクトエクスプローラ)、User-Defined Function フォルダを開きます。
- [Book1]Sheet1 の列 A と列 B をハイライトして、解析: フィット: 非線形曲線フィットと操作して NLFit ダイアログを開きます。設定タブの関数選択ページでは、UserDefine カテゴリに保存した MyFunction を選択します。



- 1 回反復ボタンをクリックして、パラメータ値の変化とフィット曲線の変化を見る事ができます。

- "1 回反復"ボタン  をクリックする。

ダイアログテーマ(H) *

設定 コード パラメータ 境界

パラメータの自動初期化を行う 隠す...

セルをダブルクリックして演算子を変更します。他のオプションを利用するにはセルを右クリックします。

ピーク番号	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
1	y0	?	<input type="checkbox"/>	1.2156	6428.1161	1	--	--	System
1	a	?	<input type="checkbox"/>	1.21919	6424.04394	1	--	--	System
1	b	?	<input type="checkbox"/>	0.00745	40.81468	0.99998	--	--	System

カイ2乗が減少しました。

フィット 完了 キャンセル

フィット曲線 残差 関数式 曲線サンプル メッセージ 関数ファイル ヒント

1

■ B
— フィット曲線 1

- "1 回復"ボタン  をクリックする。

ダイアログテーマ(H) *

設定 コード パラメータ 境界

パラメータの自動初期化を行う 隠す...

セルをダブルクリックして演算子を変更します。他のオプションを利用するにはセルを右クリックします。

ピーク番号	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
1	y0	?	<input type="checkbox"/>	1.54897	7.59462	0.99477	--	--	System
1	a	?	<input type="checkbox"/>	1.52422	6.29927	0.99897	--	--	System
1	b	?	<input type="checkbox"/>	-0.14872	0.32228	0.99728	--	--	System

カイ2乗が減少しました。

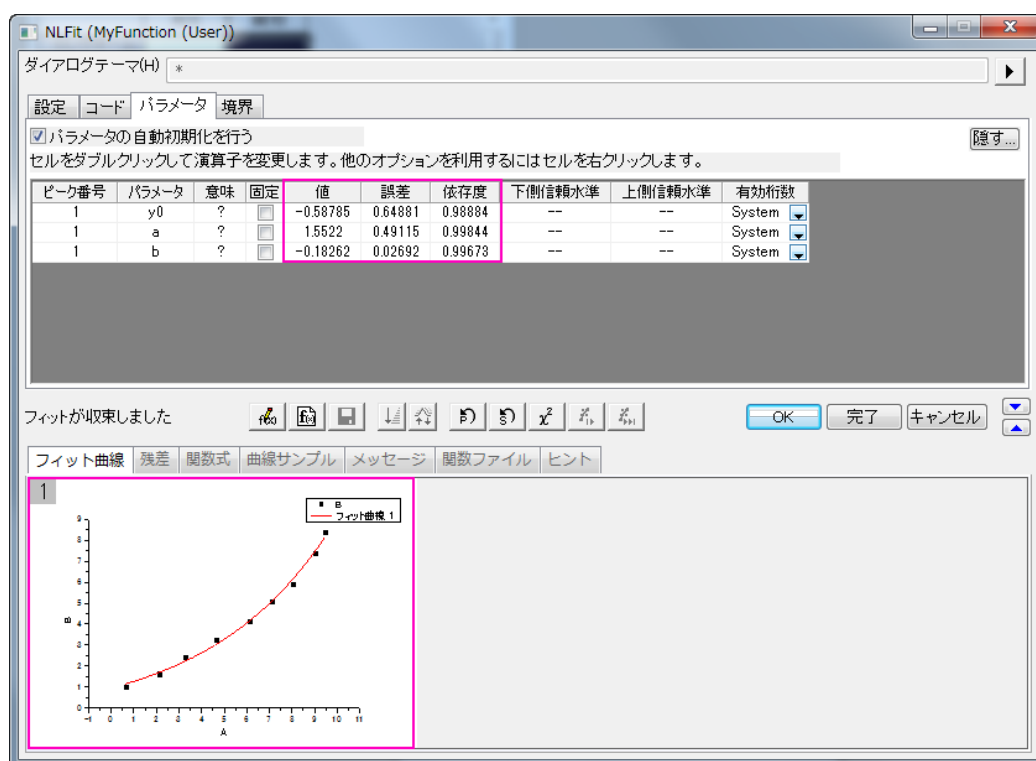
フィット 完了 キャンセル

フィット曲線 残差 関数式 曲線サンプル メッセージ 関数ファイル ヒント

1

■ B
— フィット曲線 1

- そして収束までフィットボタンをクリックします。 



10. OK ボタンをクリックすると FitNL1 レポートシートにパラメータ値やフィット統計がフィット結果として表示されます。これで、最適なパラメータとフィット統計を調査します。



システム関数で非線形フィットを行う

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ステップ](#)
 - [3.1 ファイルインポート](#)
 - [3.2 グラフを作成](#)
 - [3.3 Michaelis-Menten 関数でフィットする](#)
 - [3.4 Lineweaver-Burk プロットをフィットする](#)

サマリー

「NLFit」ダイアログは、非線形フィット処理中にフィット処理をモニタリングすることができるインタラクティブなツールです。このチュートリアルでは、Michaelis-Menten 関数を使ってフィットします。これは、酵素反応速度での基本的なモデルで、これを例にして「NLFit」ダイアログの基本機能を説明します。フィットを実行する際にグローバルフィットを実行する方法を示します。これは、いくつかのパラメータを共有して、2つのデータセットを同時にフィットするものです。

必要な Origin のバージョン:8.0 SR6


学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- 単一 ASCII ファイルをインポートする方法
- パラメータを共有してグローバルフィットを実行する方法
- フィット範囲を選択して、データの一部をフィットする方法
- コマンドウィンドウを使って、簡単な計算を行う方法

ステップ

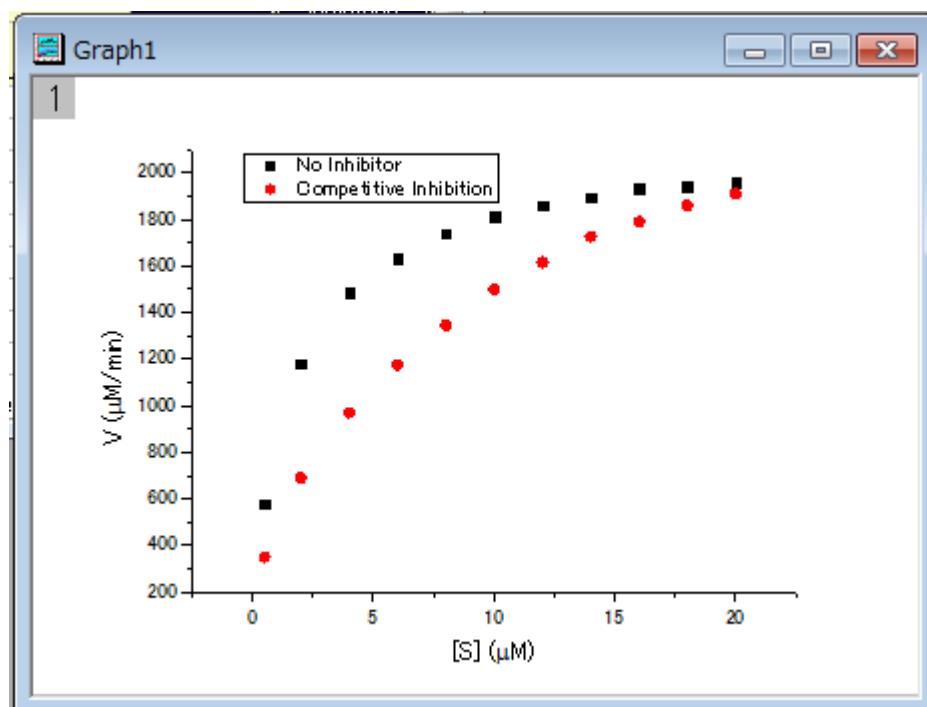
ファイルをインポートする

- ワークブックを新しく作成します。
- 単一 ASCII ファイルインポートボタン  をクリックし、「ASCII」ダイアログボックスを開きます。Samples\Curve Fitting フォルダに移動し、Enzyme.dat ファイルを開きます。ダイアログの一番下にあるオプションダイアログを表示するチェックボックスにチェックを付け、開くボタンをクリックします。
- impASC ダイアログボックスで、インポートオプションを開きます。そしてヘッダ行のノードを開き、コメント(開始行)を3に設定します。
- OK をクリックして、ファイルをインポートします。

	A(X)	B(Y)	C(Y)
ロングネーム	[S]	V	V
単位	μM	$\mu\text{M}/\text{min}$	$\mu\text{M}/\text{min}$
コメント	Substrate	No Inhibitor	Competitive Inhibition
スパークライン			
1	0.5	580	350
2	2	1180	690
3	4	1485	970
4	6	1630	1175
5	8	1740	1345
6	10	1810	1500
7	12	1860	1615
8	14	1895	1725
9	16	1935	1790
10	18	1960	1840

データをプロットする

- 列 B と列 C を選択して、 ボタンをクリックし、散布図としてプロットします。



Michaelis-Menten 関数でフィットする

単一基質の Michaelis-Menten 関数モデルは、酵素反応速度論で使用される基本モデルです。

$$v = \frac{V_{max}[S]}{K_m + [S]}$$

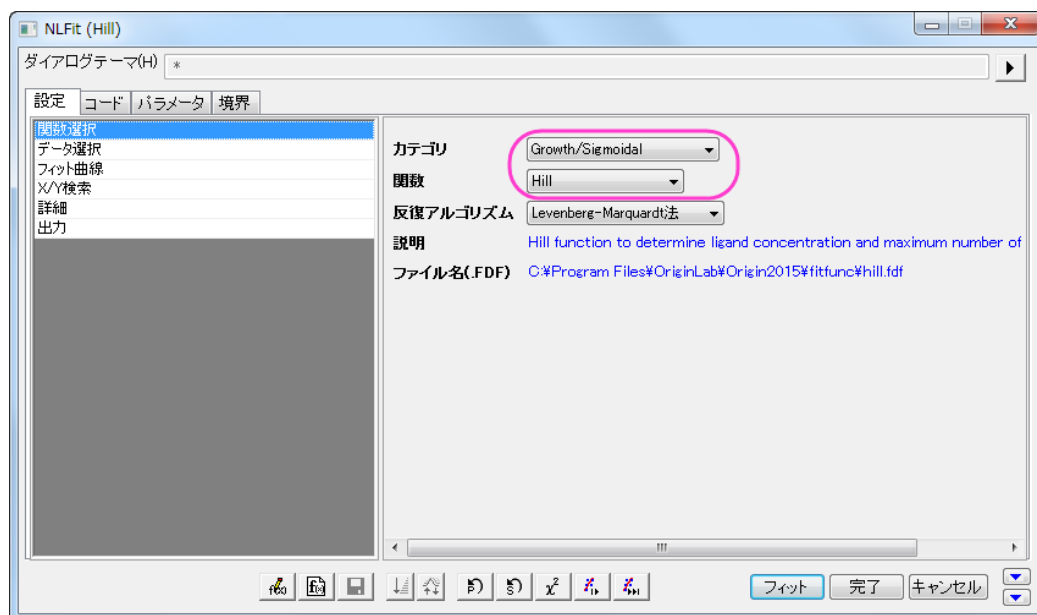
パラメータは v が反応速度、 $[S]$ は基質濃度、 V_{max} は最大速度、 K_m は、Michaelis の定数を表します。 V_{max} と K_m のパラメータは重要な酵素の特性で、これらの値は M-M (Michaelis-Menten)関数を v 対 $[S]$ でプロットした曲線にフィットして求めます。Origin には、M-M フィット関数はありませんが、より一般的なモデルである組み込みである Hill 関数を使ってフィットできます。

$$v = V_{max} \frac{x^n}{k^n + x^n}$$

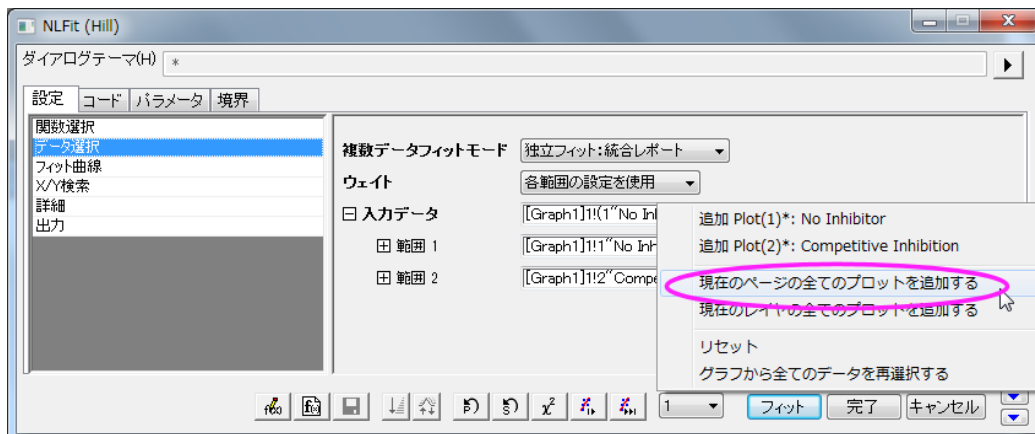
ここで、 n は結合サイトです。単一基質モデルの場合、 $n = 1$ の値は固定します。よってモデルをシンプルにして M-M 関数のように使用できるようにします。

作図したグラフを確認すると、2つの曲線がある事が分かります。ひとつは抑制物質なし、もうひとつは競合型抑制物質がある場合です。非線形曲線フィットツールを使用して2つの曲線を一度にフィットしましょう。競合抑制反応に対して、最大反応速度は抑制無しと同じなので、フィット処理中に V_{max} 値を共有することができ、グローバルフィットにより行われます。

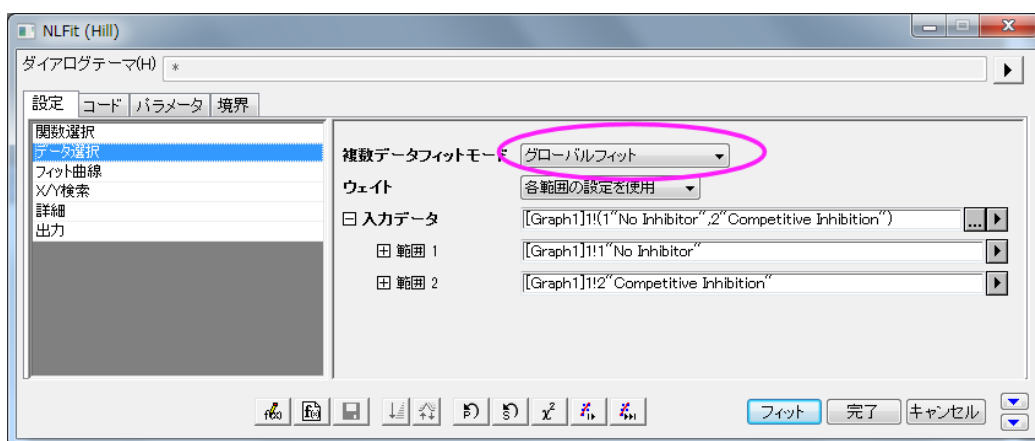
- グラフをアクティブにして、**解析:フィット:非線形曲線フィット**と操作を行い、**NLFit** ダイアログを開きます。**設定:関数選択**ページにある **Growth/Sigmoidal** カテゴリーから **Hill** 関数を選択します。



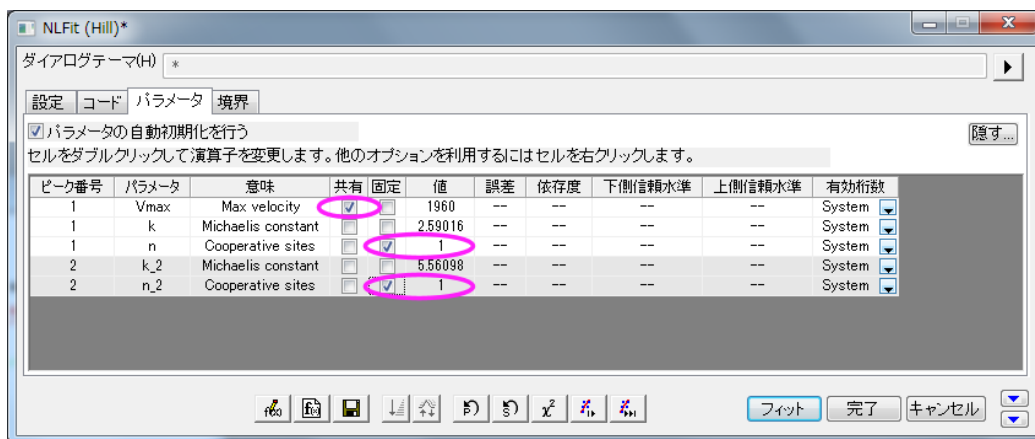
- **設定:データ選択**ページで、**入力データ**の隣にある三角形のボタンをクリックし、**現在のページのすべてのプロットを追加**を選択して、データをセットします。



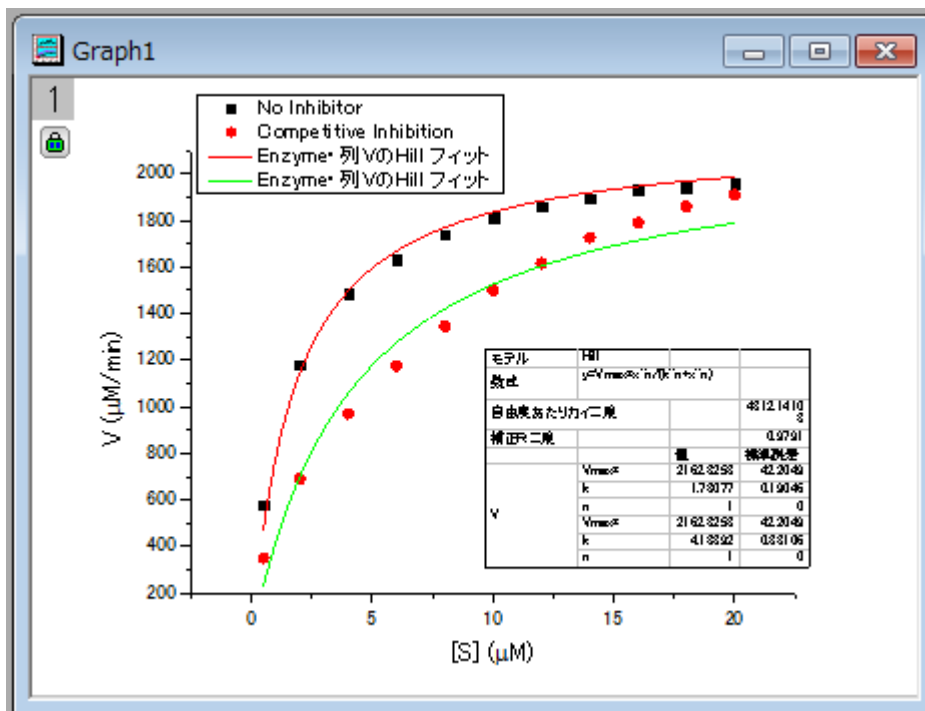
- **設定:** データ選択ページにある複数データフィットモードのドロップダウンリストから **グローバルフィット** を選択します。



- **パラメータ** タブをクリックし、Vmax の行にある **共有** チェックボックスにチェックを付けます。これらの『共有』チェックボックスは、**グローバルフィット** モードを使っているときだけ利用できます。n と n_2 の『**固定**』チェックボックスにチェックを付け、それらの値を 1 にします。



「フィット」ボタンをクリックし、分析レポートを生成します。元のグラフにフィットのパラメータが表示されます(以下の画像ではフィットパラメータ値のみが表示されています)。



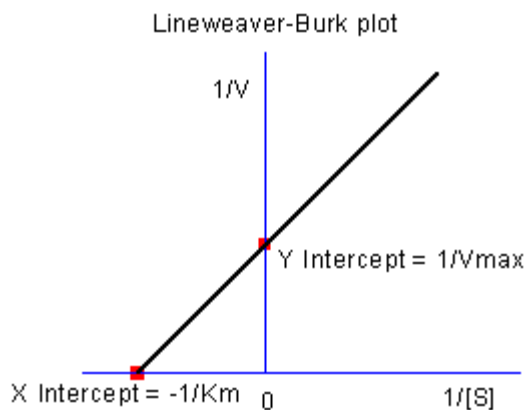
フィット結果から、最大速度は、 $2162.8 \mu M/min$ であると結論付けできます。抑制なしの場合、 K_m の値は $1.78 \mu M$ になります。競合型抑制の場合、 K_m の値は $4.18 \mu M$ になります。

Lineweaver-Burk プロットをフィットする


モデルのパラメータは、Lineweaver-Burk または二重逆数プロットによっても推定できます。Lineweaver-Burk プロットは、M-M 関数の両側の逆数を取り、 $1/v$ と $1/[S]$ でプロットします。

$$\frac{1}{v} = \frac{1}{V_{max}} + \frac{K_m}{V_{max}[S]}$$

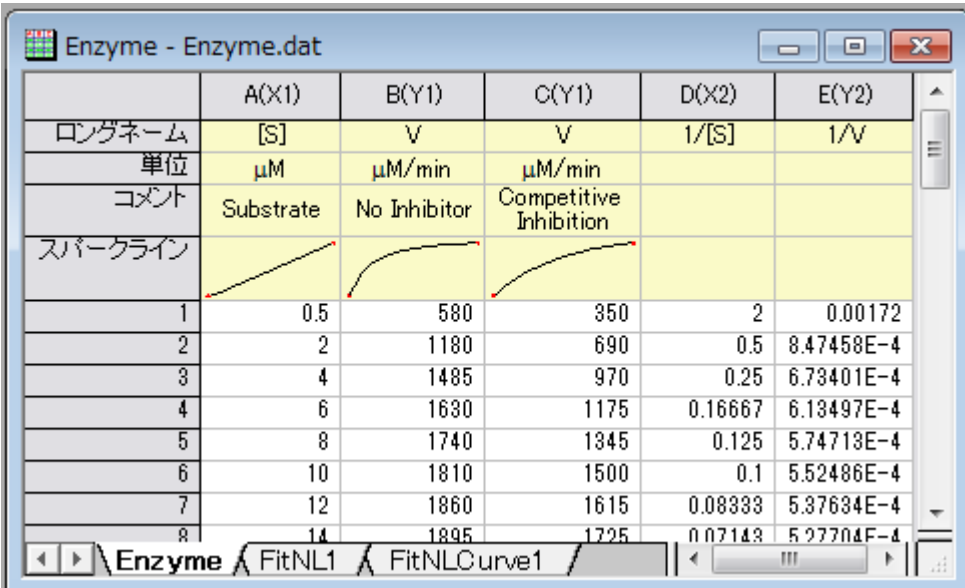
これは実際には線形の関数です。

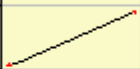
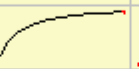
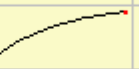



抑制無しデータを使って L-B プロットで K_m と V_{max} を計算する方法を示します。

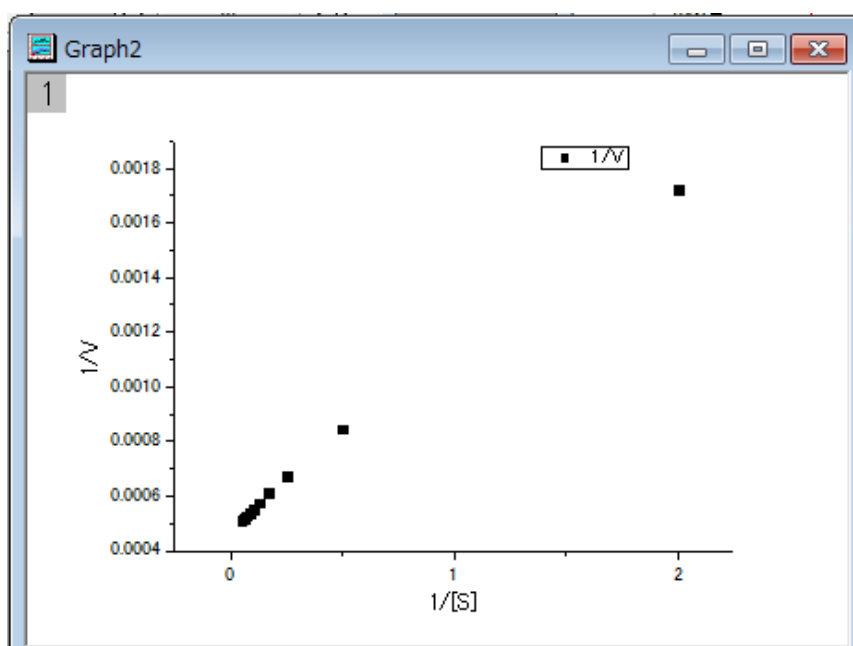
- 元のデータのワークシートに行き、 ボタンをクリックして、2つ以上の列を追加します。列 D で右クリックし、ショートカットメニューから列 XY 属性の設定: X 列を選択します。これでこの列は X 属性になりました。再び列 D を右クリックし、「列値の設定」を選び、「値の設定」ダイアログを開きます。ダイアログ編集ボックスに $1/Col(A)$ と入力し、この例では逆数の値を自動更新する必要はないので、再計算モードを「無し」にします。

同様に、列 E の値を $1/Col(B)$ としてセットします。列 D と列 E のロングネームにそれぞれ、 $1/[S]$ と $1/V$ と入力します。すると、次のようになります。




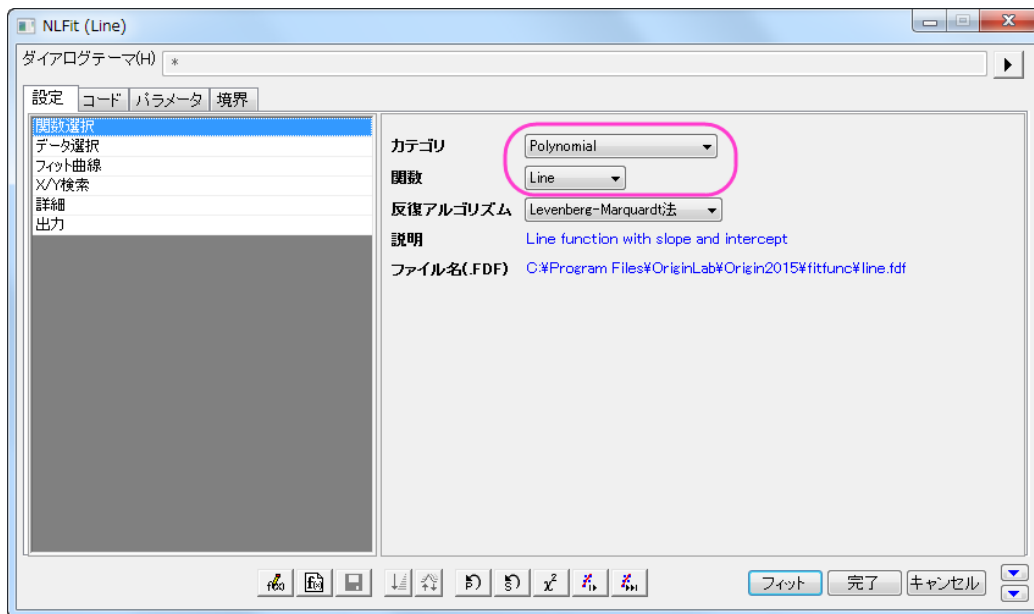
	A(X1)	B(Y1)	C(Y1)	D(X2)	E(Y2)
ロングネーム	[S]	V	V	$1/[S]$	$1/V$
単位	μM	$\mu\text{M}/\text{min}$	$\mu\text{M}/\text{min}$		
コメント	Substrate	No Inhibitor	Competitive Inhibition		
スパークライン					
1	0.5	580	350	2	0.00172
2	2	1180	690	0.5	8.47458E-4
3	4	1485	970	0.25	6.73401E-4
4	6	1630	1175	0.16667	6.13497E-4
5	8	1740	1345	0.125	5.74713E-4
6	10	1810	1500	0.1	5.52486E-4
7	12	1860	1615	0.08333	5.37634E-4
8	14	1895	1725	0.07143	5.27704E-4

- 列 D と列 E を選択し、 ボタンをクリックして、散布図を作成します。

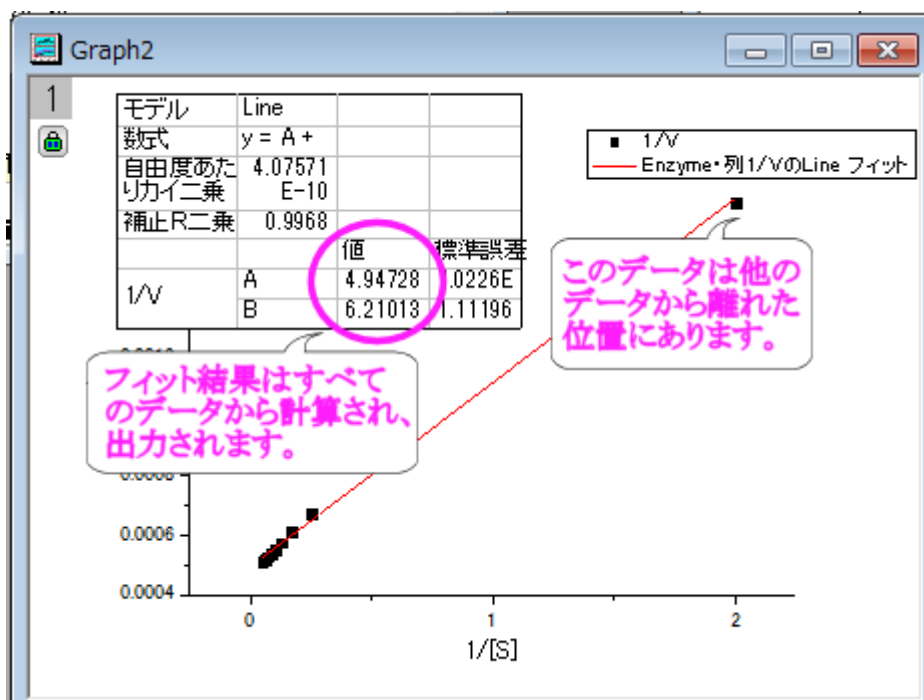


上記の式から、 $1/v$ と $1/[S]$ には線形的関係があることが分かっているので、線形フィットツールを使って、このプロットを直線でフィットできます。(また次の手順からも線形フィットツールを使うこともできます。「解析:フィット:線形フィット」)

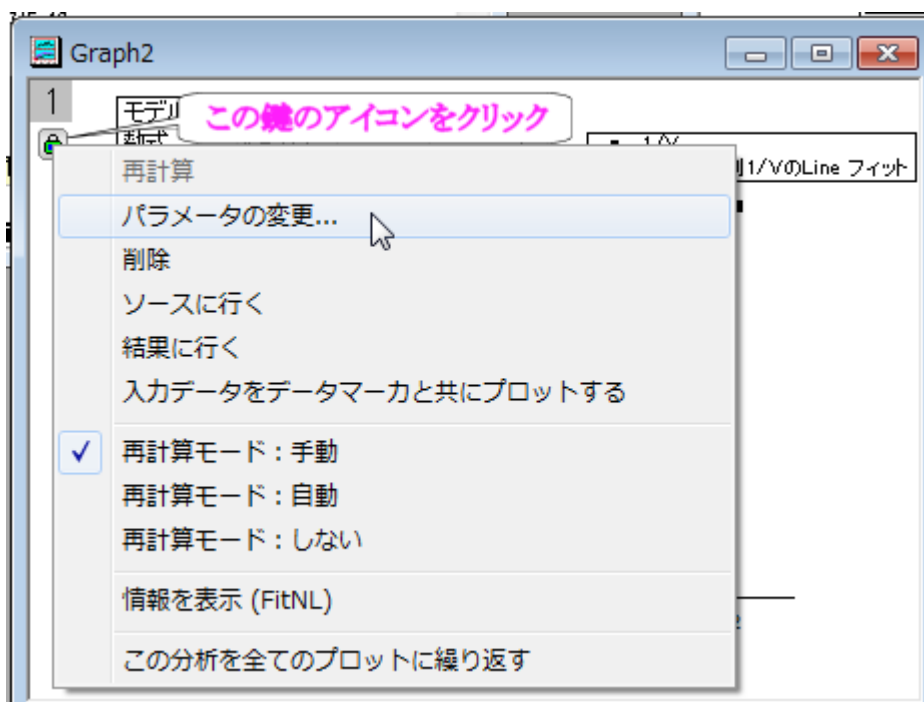
- もう一度、非線形曲線フィットのダイアログを開き、「Polynomial」カテゴリーから Line 関数を選び、「フィット」ボタン  をクリックして、直接結果を生成します。




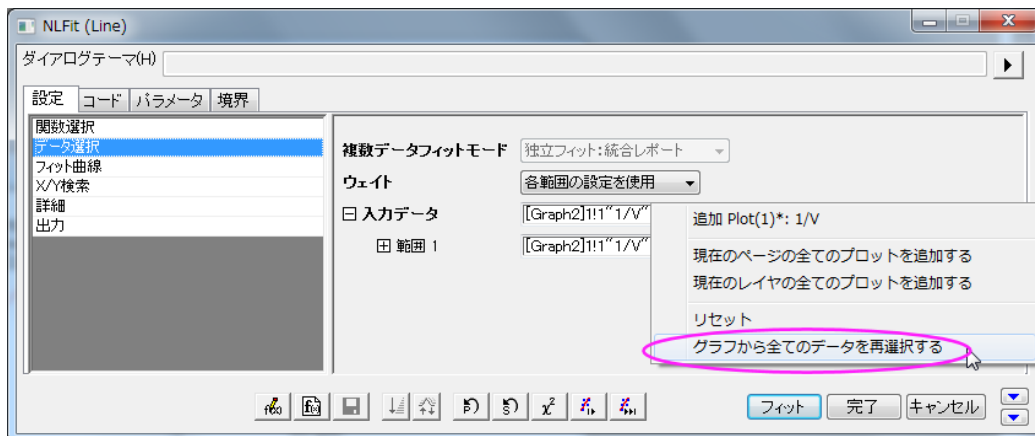
プロットから離れているデータポイントがあるので、これが最も良いフィットであるかどうかは疑う必要があります。実際、L-B プロットの右側には、低い基質濃度の領域があり、測定誤差が大きいかもしれません。そのため、これらのデータポイントを除外した方が無難でしょう。




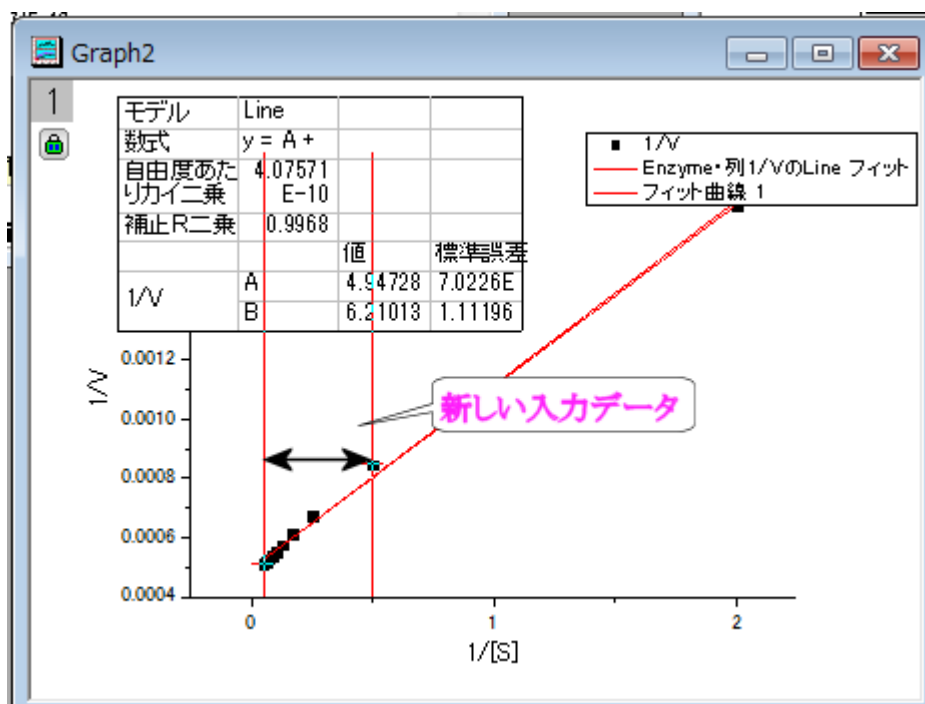
- グラフの左上の角にある錠のアイコンをクリックして、パラメータの変更を選び、NLFit ダイアログに戻ります。




設定: データ選択ページで、入力データノードにある  ボタンをクリックし、メニューから「グラフからすべてのデータを再選択する」を選択します。



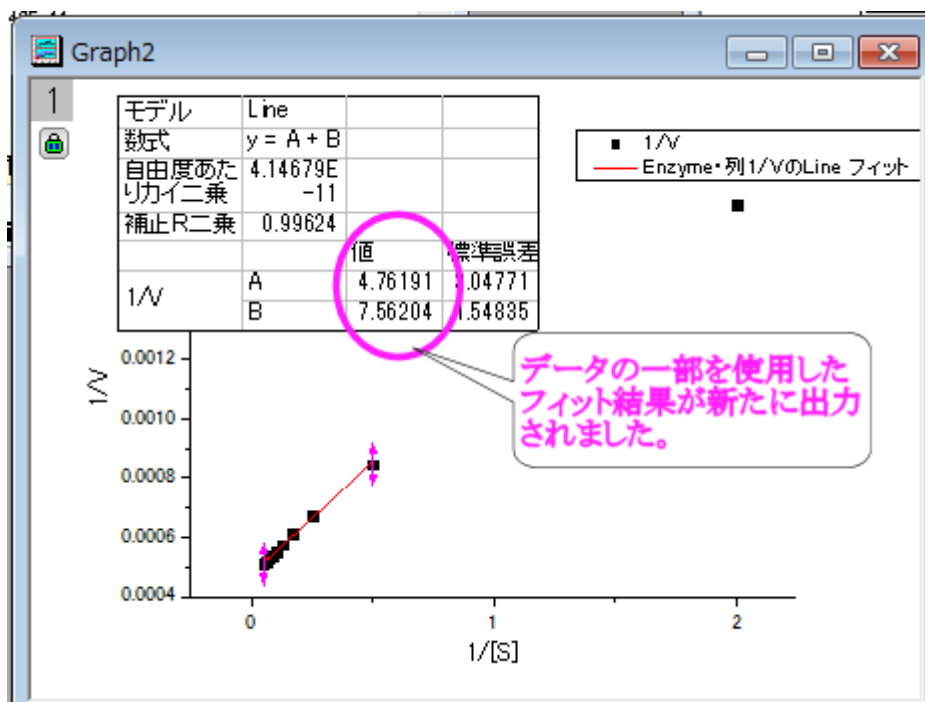
NLFit ダイアログは最小化し、グラフページにカーソルを移動すると、カーソルが  のようになります。フィットしたデータポイントを囲むようにドラッグして矩形を描きます。すると、入力範囲は縦線で印が付けられます。縦線をクリックして移動すれば、入力範囲を変更することができます。



グラフから範囲を選択するにある  ボタンをクリックして、「NLFit」ダイアログに戻ります。



- 「NLFit」ダイアログの「フィット」ボタンをクリックして、結果を再計算します。レポートテーブルが更新されたのがグラフから分かります。



- フィット曲線の切片が $1/V_{max}$ であり、この例では、これは $4.76191E-4$ です。 V_{max} 値を得るには、**ウィンドウ:コマンドウィンドウ** を選択し、コマンドウィンドウを開き、次のように入力します。

$1/4.76191E-4 =$

そして ENTER キーを押します。

```

//--2011/11/07 19:47
1/4.76191E-4 =;
>>1/4.76191E-4 =
1/4.76191E-4=2099.9976900025
>>

```

Origin は 2099 という値を返し、これは上記で得た 2160 に近い数字となっています。(Hill 関数でフィットしたとき、2つのデータセットをフィットするのに V_{max} を共有しました。抑制無し of データのみをフィットすれば、この値はもっと近くなります。)

パラメータ共有でのグローバルフィット

サマリー

グローバルフィットは、複数曲線を同時にフィットする際の Origin のフィットモードの 1 つです。データセットは個別のままなので、フィット処理の際にパラメータ値を共有できます。パラメータが共有されると、1 つのパラメータ値が計算されて、全データセットに使用され、共有しないとデータセットごとに異なるパラメータ値を計算します。

対照的に、連結フィットは全データセットを一つのデータセットに連結して実行されます。非線形フィットは一つのデータセットに対して実行されますので、パラメータ値の一つのセットのみが戻されます。




Origin2016 SR2 から、新しいアプリ [Sequential Fit](#) がリリースされ、複数のデータで連続したフィットが行えるようになりました。このアプリでは、現在のデータセットから取得したパラメータ値を次のデータセットでも初期値として利用出来ます。順番に共通パラメータを変化させていく必要のある複数のデータに対して、最適なアプリです。

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について解説します

- 複数データセットを選択する
- 異なるフィットモードを選択する
- パラメータを共有してグローバルフィットを実行する

ステップ

1. 新規ワークブックボタン  をクリックします。
2.  ボタンをクリックして、<Origin EXE Folder>\Samples\Curve Fitting\フォルダの、**Enzyme.dat** ファイルをインポートします。
3. B、C 列を選択して  ボタンをクリックし、散布図を作図します。
4. グラフウィンドウがアクティブなまま、**解析:フィット:非線形曲線フィット...**メニューを選択し、**NLFit** ダイアログを開きます。
5. **再計算モード**はドロップダウンから**自動**を選択します。
6. **関数選択**ページで、**Growth/Sigmoidal** カテゴリーから **Hill** 関数を選択します。
7. **データ選択**ページで、**入力データ**の隣にある三角形のボタンをクリックし、**現在のレイヤのすべてのプロットを追加する**を選択して、データをセットします。

8. 複数データフィットモードのドロップダウンリストからグローバルフィットを選択します。



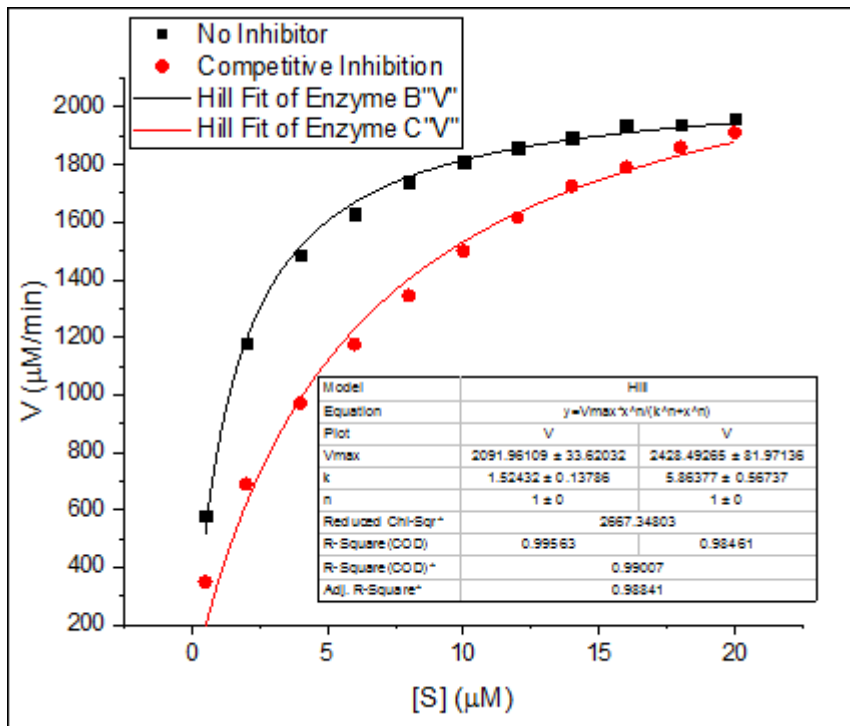
9. パラメータタブに移動し、 n と n_2 の固定チェックボックスにチェックを付け、それらの値を 1 にします。

ピーク番号	パラメータ	意味	共有	固定	値	誤差
1	Vmax	Max velocity	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1960	--
1	k	Michaelis constant	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	2.59016	--
1	n	Cooperative sites	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	1	--
2	Vmax_2	Max velocity	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1910	--
2	k_2	Michaelis constant	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	5.56098	--
2	n_2	Cooperative sites	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	1	--

10. フィットボタンをクリックして、フィットを実行します。結果シートのパラメータ表でフィット結果を確認できます。

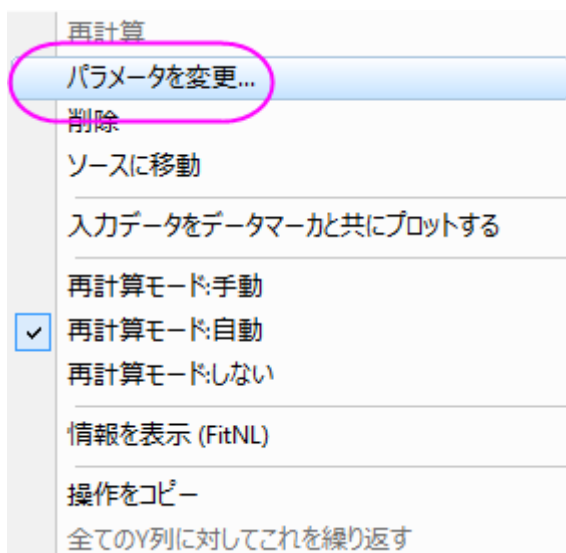
		Value	Standard Error	t-Value	Prob> t	Dependency
V	Vmax	2091.96109	33.62032	62.22311	--	0.66992
	k	1.52432	0.13786	11.05711	--	0.66992
	n	1	0	--	--	0
	Vmax	2428.49265	81.97136	29.62611	0	0.89747
	k	5.86377	0.56737	10.33497	5.36612E-9	0.89747
	n	1	0	--	--	0

11. グラフの元データプロットに、フィット曲線が追加されます。



12. この場合、最大の反応速度、Vmax は同じかもしれませんが。次に、このパラメータを共有してフィットしてみましょう。

13. レポートワークシートにある緑の鍵のアイコンをクリックして、**パラメータの変更**を選び、NLFit ダイアログを再度開きます。



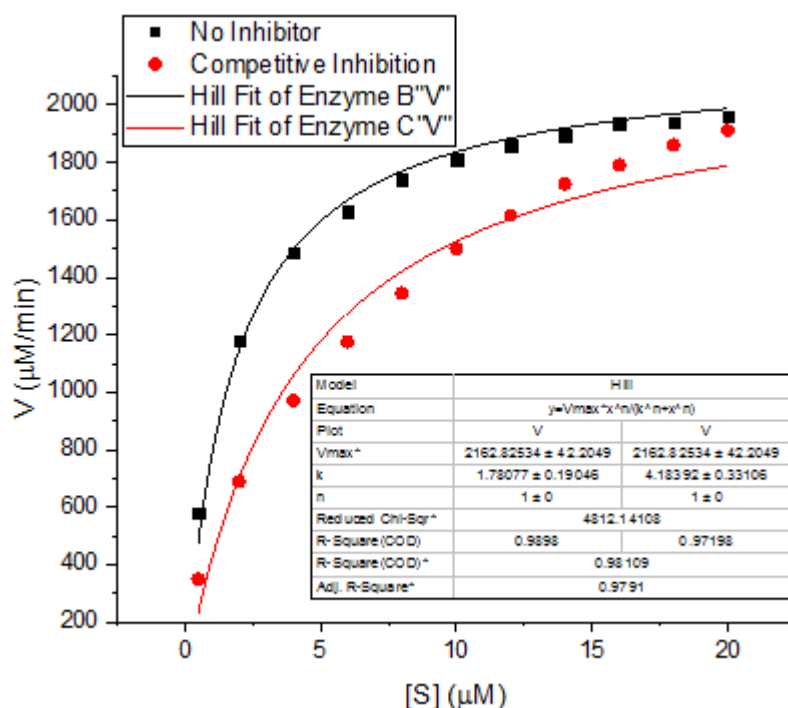
14. パラメータタブで、Vmax の「共有」チェックボックスにチェックを付けます。

ピーク番号	パラメータ	意味	共有	固定	値	誤差
1	Vmax	Max velocity	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1960	--
1	k	Michaelis constant	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	2.59016	--
1	n	Cooperative sites	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	1	--
2	k_2	Michaelis constant	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	5.56098	--
2	n_2	Cooperative sites	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	1	--

15. 「フィット」ボタンをクリックし、結果を生成します。両方の曲線の Vmax の値が同じであることが分かります。パラメータ名のアスタリスクはこのパラメータが共有されていることを表しています。

		Value	Standard Error	t-Value	Prob> t	Dependency
V	Vmax*	2162.82534	42.2049	51.24584	--	0.76631
	k	1.78077	0.19046	9.35003	--	0.63991
	n	1	0	--	--	0
	Vmax*	2162.82534	42.2049	51.24584	0	0.76631
	k	4.18392	0.33106	12.63784	1.07513E-10	0.60034
	n	1	0	--	--	0

16. フィット曲線も更新されました。



共有パラメータを使った異なる関数でのグローバルフィット

サマリー

このチュートリアルでは、次の問題を解決することを目的としています。それぞれのカーブに対して異なる関数を用い、2つまたはそれ以上の曲線に対して、グローバル曲線フィットを行う際に、いくつかのパラメーターを共有しようとすると、共有したパラメーターは全てのデータセットに共通となってしまいます。この問題は、異方性スペクトルのフィットなどの多種多様な科学分野に起こります。



必要な Origin のバージョン: Origin 2015 SR0

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- グローバルフィットを行うために、複数のデータセットを選択します。
- 全ての関数に繋がる切り替えパラメーターを設定します。
- 複数のフィット関数に共有されるパラメーターで、グローバルフィットを実行します。

ステップ

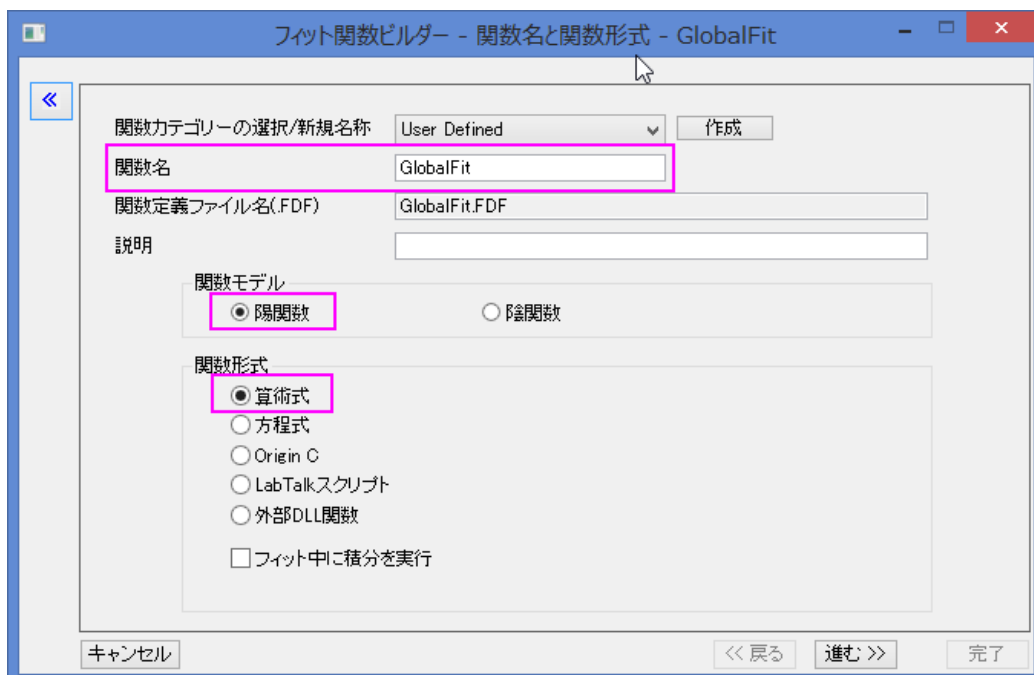
1. 新規ワークブックボタン  をクリックして、新規ワークブックを作成します。
2.  ボタンをクリックして、<Origin EXE Folder>\Samples\Curve Fitting\フォルダの、MultiFunctionsFit.dat ファイルをインポートします。
3. 列 A、列 B と列 C を選択し、メニューから **解析: フィット: 非線形曲線フィット** と操作して **NLFit** ダイアログを開きます。次の 3 つのステップで、ユーザー定義のフィット関数を作成します。その関数は、次の数式的モデルを元に構築されます。

$$Col(B): L_1 = \frac{A_1 e^{-t/t_0} + B_1}{A_2 e^{-t/t_0} + B_2}$$

$$Col(C): L_2 = A_2 e^{-t/t_0} + B_2$$

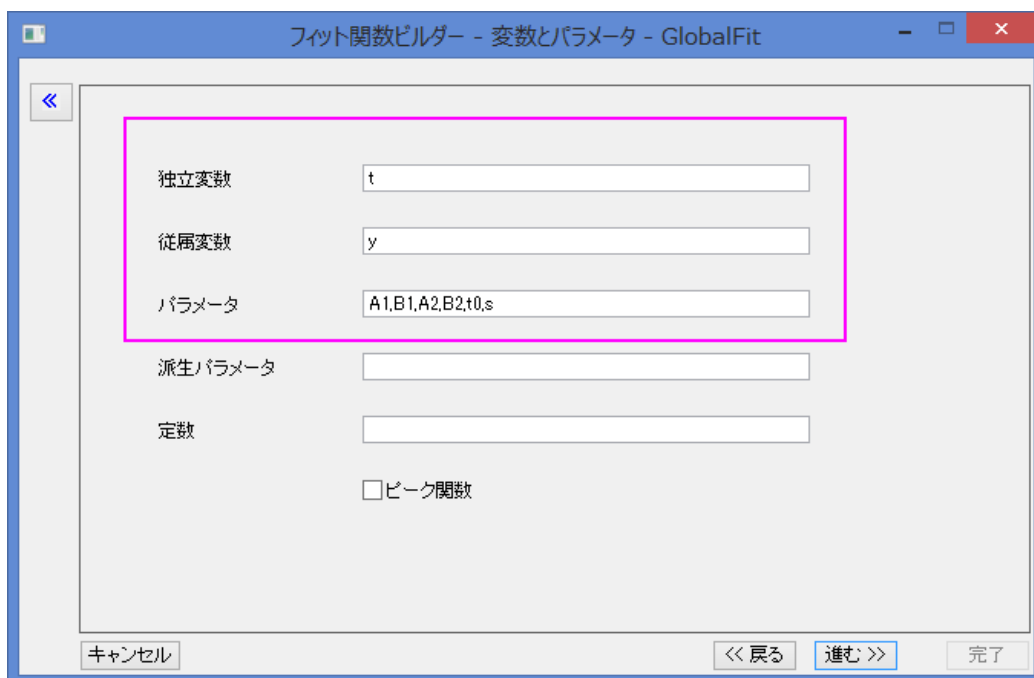
4. **関数選択** ページで、**User Defined** カテゴリから **H<新規..>** 関数を選択します。

5. 関数名に"GlobalFit" と入力し、関数モデルと関数形式を次の図のように設定します。



進むをクリックし、変数とパラメータの設定ページに移動します。

6. 変数とパラメータを、下の図のように設定します。



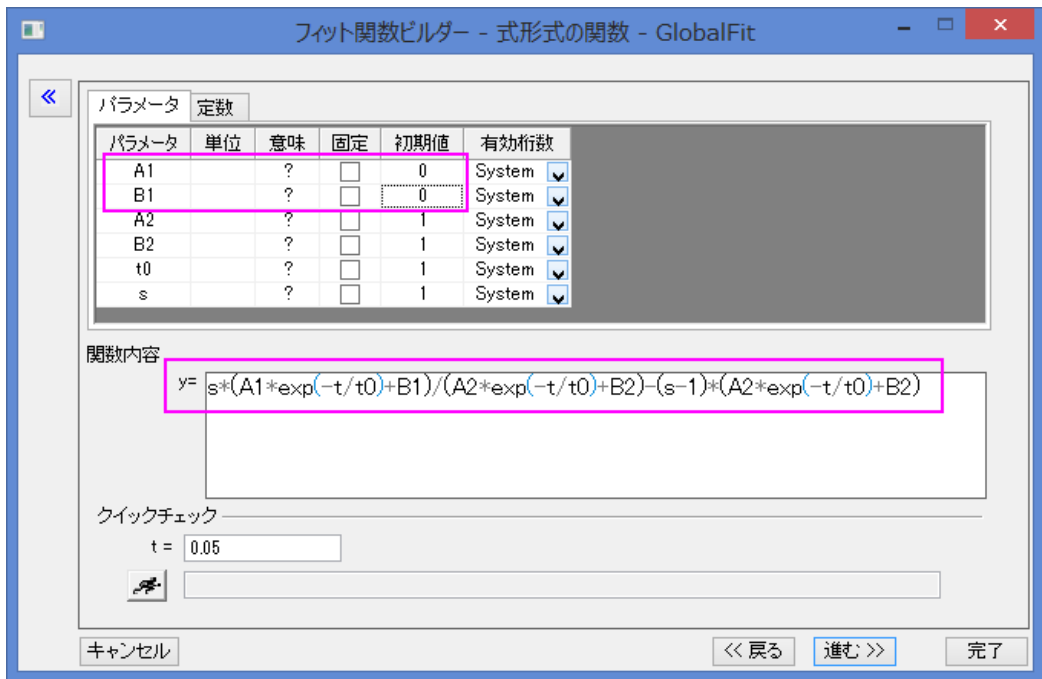
次に、進む をクリックし、式形式の関数ページに移動します。

7. 関数内容のボックスにある L_1 と L_2 の関数式を含む式形式を入力します。

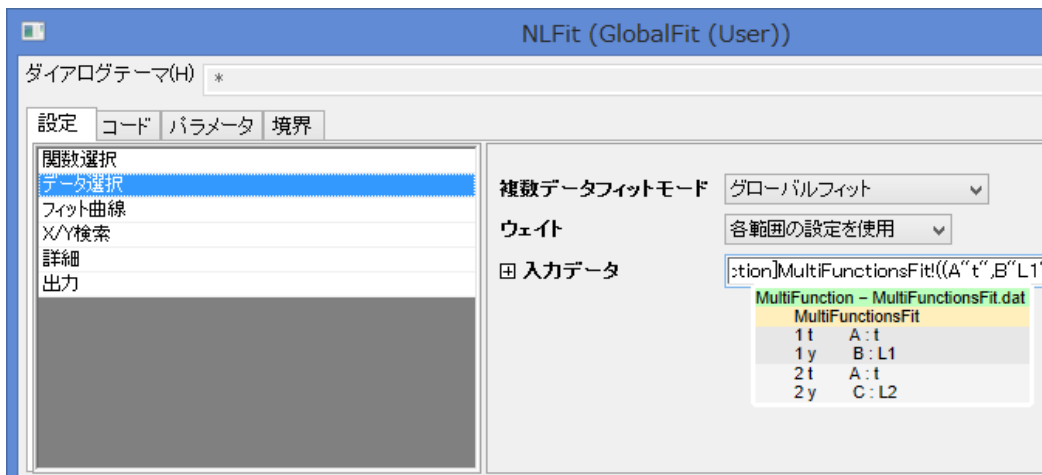
$$s * (A1 * \exp(-t/t0) + B1) / (A2 * \exp(-t/t0) + B2) - (s-1) * (A2 * \exp(-t/t0) + B2)$$

The parameter s is a switch for global fitting, if $s=1$, the L_1 is used for fitting, if $s=0$, L_2 が、フィット計算に使わ

れます。 s の値は次のフィット手順で制御されます。 $A1$ と $B1$ の初期値を設定します。そして、OK をクリックします。



8. NLFit ダイアログに戻り、Use Defined カテゴリの GlobalFit 関数を選択します。データ選択ページに移動し、複数データフィットモードのドロップダウンリストからグローバルフィットを選択します。



9. パラメータタブに移動し、A2 と B、t0 の共有のチェックボックスにチェックを入れ、s と s₂ の固定のボックスにチェックを入れ、それぞれに 1 と 0 を入力します。s の設定では、L₂を利用して C 列をフィットしながら、L₁を使って B 列を

フィット制御します。

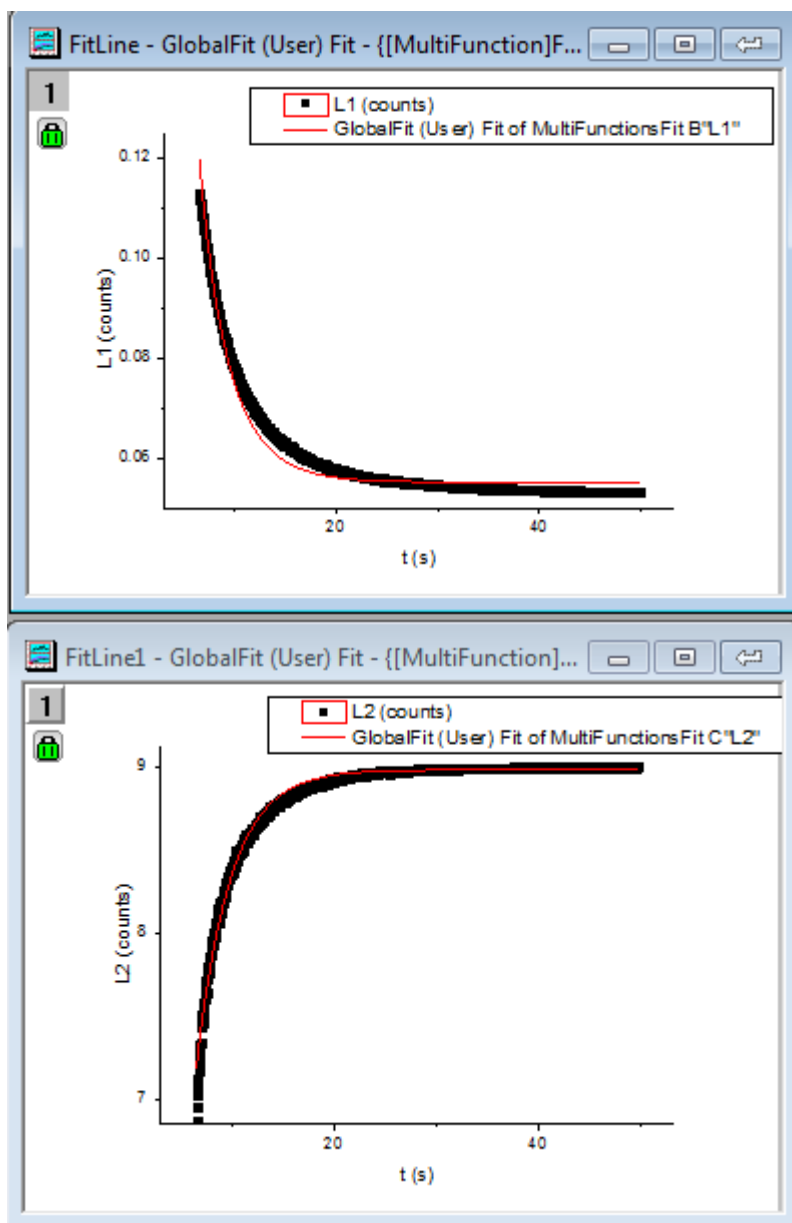
設定	コード	パラメータ	境界			
<input checked="" type="checkbox"/> パラメータの自動初期化を行う						
セルをダブルクリックして演算子を変更します。他のオプションを						
ピーク番号	パラメータ	意味	共有	固定	値	誤差
1	A1	?	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	0	--
1	B1	?	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	0	--
1	A2	?	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1	--
1	B2	?	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1	--
1	t0	?	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1	--
1	s	?	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	1	--
2	A1_2	?	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	0	--
2	B1_2	?	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	0	--
2	s_2	?	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	0	--

10. フィットボタンをクリックして、フィットを実行します。結果シートのパラメータ表でフィット結果を確認できます。

		値	標準誤差
L1	A1	2.58871	0.16787
	B1	0.4959	0.00528
	A2*	-12.67873	0.10351
	B2*	8.98101	6.55359E-4
	t0*	3.34629	0.01131
	s	1	0
L2	A1	0	0
	B1	0	0
	A2*	-12.67873	0.10351
	B2*	8.98101	6.55359E-4
	t0*	3.34629	0.01131
	s	0	0

共有

11. グラフの元データプロットに、フィット曲線が追加されます。B 列のフィット曲線 L_1 と、C 列のフィット曲線 L_2 は **GlobalFit (User) Fit of Multiple Dataset** のグラフをダブルクリックすると確認することができます。



NLFit 内で LabTalk を使用してパラメータ初期化を行う

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ステップ](#)
 - [3.1 ユーザ定義フィット関数でパラメータ初期化スクリプトを作成する](#)
 - [3.2 ユーザ定義フィット関数を使用してデータをフィットする](#)
 - [3.3 分析テンプレートを作成してバッチ処理を行う](#)

サマリー

以前のバージョンの Origin では、フィットパラメータの初期化を行うのに OriginC コードを使用する必要がありました。Origin9.0 SR1 以降では、LabTalk スクリプトを使用して初期化パラメータを設定できるようになりました。これは、ワークシートの値を初期パラメータとして使用したい時などに特に便利です。

このチュートリアルでは、3つの異なる気温に対してそれぞれの吸着摂取曲線を描き、結果を3つの.txtファイルにエクスポートする方法を学びます。数の条件はヘッダ情報と同じ.txtファイルに保存されています。isothermal-spherical モデルの以下の数式を使用してデータをフィットします。

$$y = 1 - \frac{6}{\pi^2} * \exp\left(-\frac{\pi^2}{T} * x\right)$$

ここで、y は正規化された摂取質量(mg/g)、x は時間帯(s)、T は時間定数(1/s)、それとフィットパラメータです。時間定数と温度の関係については以下の経験式から説明されます。

$$T = 25000 - 58 * Temp$$

各温度の摂取曲線では、この経験式から T を計算し、その値を初期値として曲線フィットに使用します。

必要な Origin のバージョン: Origin 9.0 SR1 以降

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について解説します:

- ユーザ定義のフィット関数を定義し、LabTalk スクリプトを使用してパラメータ初期化を行う
- ワークシート内の値を初期パラメータとして使用する

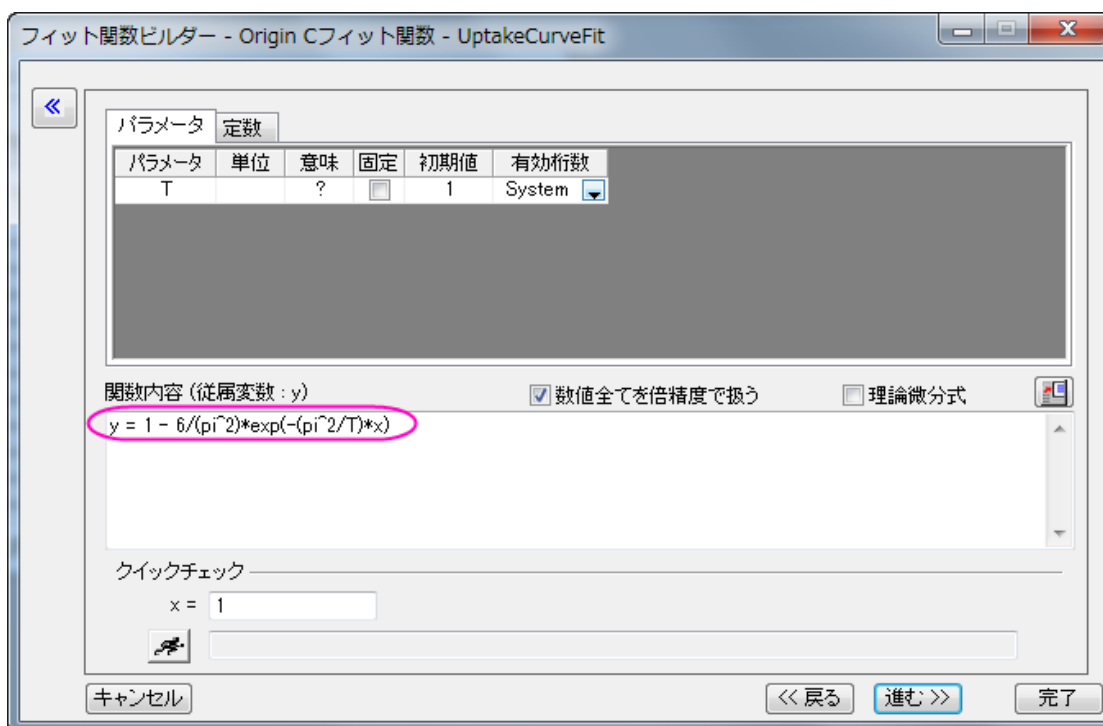
ステップ

ユーザ定義フィット関数でパラメータ初期化スクリプトを作成する

1. ツール:フィット関数ビルダ (または F8 キーを押す) と選択してフィット関数ビルダを開きます。処理のゴールページで新しい関数の作成を選択して進むをクリックします。
2. 関数名と関数形式のページでは、関数が User Defined カテゴリーの中に作成されるようにします。関数名をとって UptakeCurveFit を入力し、関数モデルは陽関数、関数式は OriginC とします。進むボタンをクリックします。

- 変数とパラメータページでは、**独立変数と従属変数**をそれぞれデフォルトのままである **x** と **y** にします。**パラメータ**を **T** として、**進む**をクリックします。
- Origin C フィット関数**ページでは、以下の数式を**関数内容**集ボックスに入力して**進む**をクリックします。

$$y = 1 - 6 / (\pi^2) * \exp(-(\pi^2 / T) * x)$$



- パラメータ初期化コード**のページでは、**カスタムコード**を使用するのラジオボタンを選択して、**LabTalk**を利用のラジオボタンを選択して、Labtalk スクリプトを利用できるようにします。**初期化コード**編集ボックスに、以下のコードを入力します。



```
//パラメータ初期化で実行するコード
//現在のワークシートを取得
range rpage=ry.getpage() $;
//ワークシートデータを取得
range rlayer=ry.getlayer() $;
//ワークシートデータのインデックスを取得
int inext=rlayer.index;
//データワークブックがアクティブであることを確認
win -a %(ry.getpage() $);
//データワークシートがアクティブであることを確認
page.active=inext;
//データワークシートの列 2 をアクティブ化
wks.col=2;
//列の内容から温度を文字列として取得
string str1$ = wks.col.comment$;
```

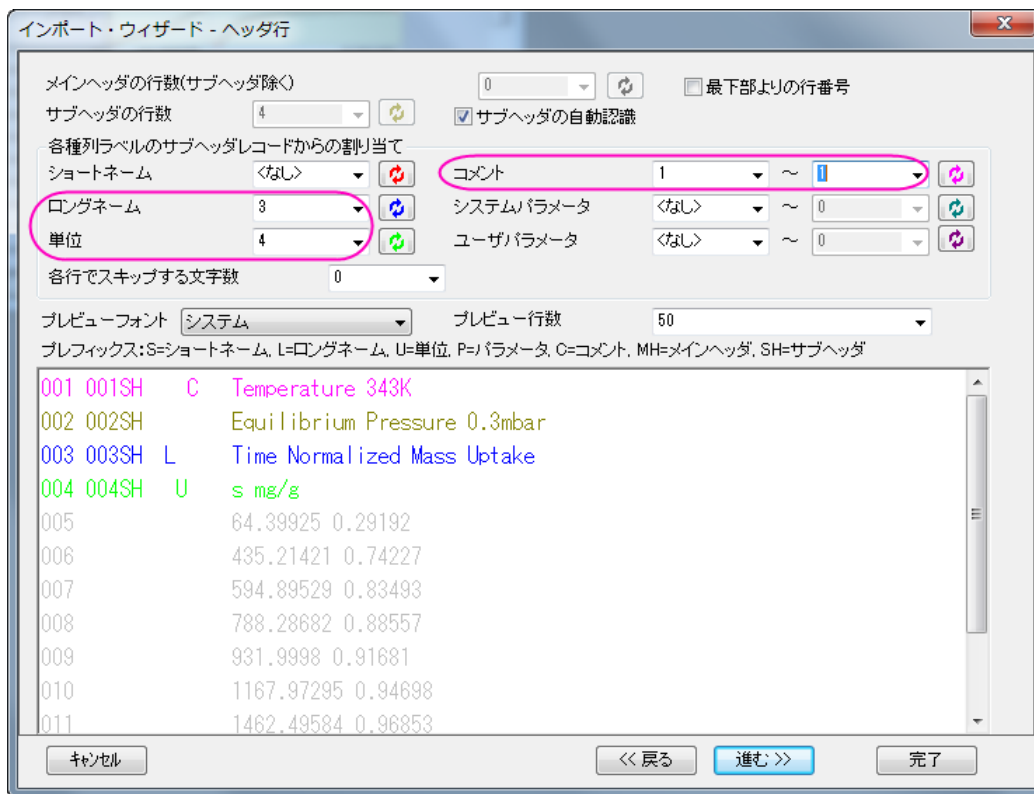
```
//温度の数字を文字列から取得
string str2$ = str1.Left(3)$;
//文字列の値から倍精度の数値に変換
double Temp = %(str2$);
//経験式を使用して T の初期値を計算
T=25000 - 58 * Temp;
//パラメータ初期化スクリプトが正確に実行されるか確認
type -b "Experimental temperature is $(Temp) K, so the initial value of T
is $(T)."
```

Notes: 上記スクリプト内の r_y は、パラメータ y の入力データ範囲に関する自動決定範囲変数です。このような範囲変数に関するシンタックスは「 $r+parameter\ name$ 」になります。例えば、パラメータ名が $Temp$ の場合、範囲変数は $rTemp$ になります。

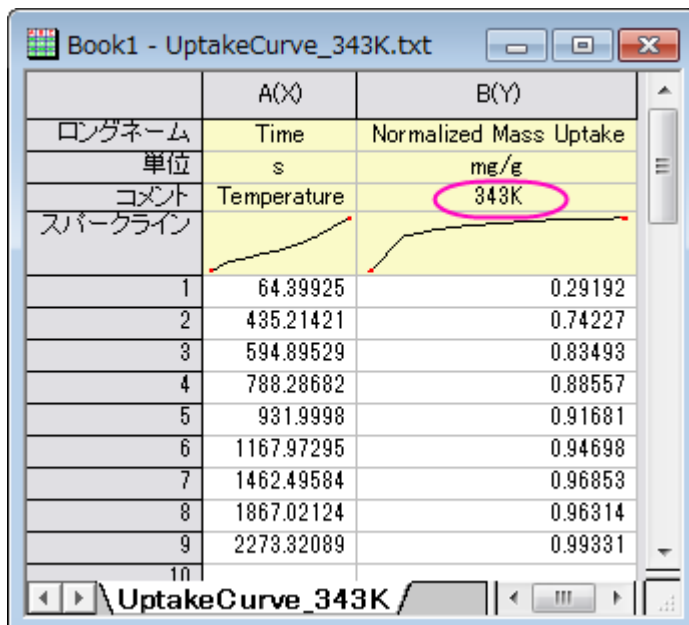
7. 完了をクリックしてユーザ定義フィット関数 **UptakeCurveFit** の定義を終了します。ユーザファイルフォルダに.fdf ファイルが保存されているはずです。

ユーザ定義フィット関数を使用してデータをフィットする

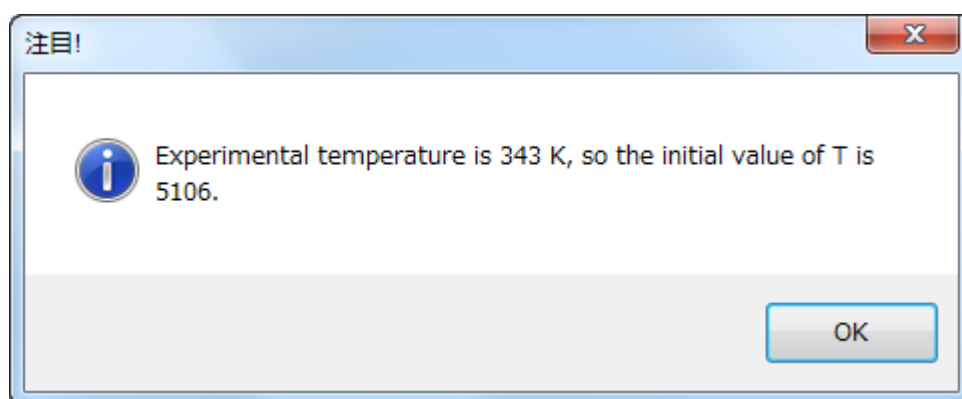
1. 標準ツールバーの新規プロジェクトボタン  をクリックして、新しい行列を作成します。  ボタンをクリック(または、メニューのデータ:ファイルからインポート:インポートウィザードと操作、または **Ctrl+3** キーを押す)してインポートウィザードを開きます。
2. データ操作では<Origin Folder>\Samples\Curve Fitting\フォルダにある **UptakeCurve_343K.txt** ファイルを選択します。進むボタンを 2 回クリックしてヘッダ行ページに移動します。ロングネーム、単位、コメントを順に 3、4、1 から 1 と設定します。




3. 完了ボタンをクリックして、ファイルをインポートします。実験温度はコメントの 2 列目に入力されました。これが **UptakeCurveFit** フィット関数で初期化コード LabTalk スクリプトを実行する時に取得するものです。



4. 列 B を選択して**解析:フィット:非線形曲線フィット**を選択(または、**Ctrl+Y** を押す)して **NLFit** ダイアログを開きます。カテゴリで **User Defined** を選択し、関数では **UptakeCurveFit(User)** を選択します。
5. 注目ダイアログがポップアップし、実験温度と計算された時間定数を表示します。



6. パラメータタブを開き初期パラメータの T が 5106、つまり計算された実験温度であることを確認します。これはパラメータ初期化スクリプトが正常に呼び出されたことを示しています。
7. コードタブを開き、パラメータ初期化セクションを開くと、ここでパラメータ初期化スクリプトを再度確認でき、値は  ボタンをクリックすると表示できます。
8. OK をクリックして注目ダイアログを閉じ、フィットをクリックしてフィットを実行します。

分析テンプレートを作成してバッチ処理を行う

1. 先程のステップで作成された **FitNL1** の結果シートに行きます。概要表の右にある三角形ボタンをクリックして新しいシートとしてコピーを作成を選択します。新しいシートが作成され、新しいシートの列 A を削除して名前を **Result** とします。

	A(X)	B(Y)	C(yEr±)	D(Y)	E(Y)
ロングネーム		T	T	統計	統計
パラメータ		値	標準誤差	度あたりカイ	補正R二乗
1	Normalized Mass Uptake	5034.71487	690.3704	0.00391	0.91875
2					
3					

2. ワークブックをアクティブにしたまま、ファイル:ワークシートを分析テンプレートとして保存をクリックしてワークブックを **MyUptakeFit.ogw** として保存します。
3. 新しいプロジェクトを作成し、メニューからファイル:バッチ処理と選択して **batchProcess** ダイアログを開きます。
4. 分析テンプレート **MyUptakeFit.ogw** をロードし、<Origin Folder>\Samples\Curve Fitting\内にある **UptakeCurve_343K.txt**、**UptakeCurve_373K.txt**、**UptakeCurve_403K.txt** を選択します。データセット識別子ではファイル名を選択し、他の設定も下図と同じ状態であることを確認してください。

バッチ処理モード

 アクティブ分析テンプレートウィンドウ中に繰り返しインポート

 分析テンプレートをロード

分析テンプレート

データソース

ワークブックのインポート設定を利用

ファイルリスト

データセット識別子

データシート

結果シート

結果シートの内容は以下に示す別のブックの出力シートに追加されます。

出力シート

中途生成されたワークブックの削除

オプション

追加の開始行番号

開始時に出力シートをクリア

ラベル行の追加 (最初のファイル)

5. **OK** をクリックしてバッチ処理を実行します。実行される各ファイルに注目ボックスがポップアップされ、初期値として使用される値が表示されます。ポップアップされるたびに **OK** ボタンをクリックしてバッチ処理を続けます。下記のようなレポートが表示されます。

	A(Y)	B(X)	C(Y)	D(yEr ±)	E(Y)	F(Y)
ロングネーム	データセット		T	T	統計	統計
パラメータ			値	標準誤差	自由度あたりカイニ乗	補正R二乗
1	UptakeCurve_343K.txt	Normalized Mass Uptake	5034.71487	690.3704	0.00391	0.91875
2	UptakeCurve_373K.txt	Normalized Mass Uptake	2821.73125	210.70923	5.37589E-4	0.98522
3	UptakeCurve_403K.txt	Normalized Mass Uptake	1954.30438	176.04279	3.45543E-4	0.98809
4						



ユーザ定義フィット関数

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ステップ](#)
 - [3.1 フィット関数を作成する](#)
 - [3.2 カーブフィットを実行する](#)

サマリー

200以上の組み込みフィット関数に加えて、ユーザ自身で作成したフィット関数を作成することが出来ます。Originではユーザ定義の関数を作成する方法があります。

- [Simple Fit アプリ](#)

Simple Fit アプリは、 $y = f(x)$ 形式で構成される簡単な関数でフィットするより便利な方法を提供します。関数式を入力して、初期値を指定するだけで、すぐにフィット結果をレポート出力します。ファイル交換の場でこのアプリの使い方を学べます。

- **クイックフィットガジェット**

クイックフィットガジェットは、詳細な設定まで可能だが、少々複雑な線形フィットダイアログ及び非線形曲線フィットダイアログを開くことなく、線形及び非線形の両方を簡単に実行できる別の方法です。このガジェットでフィットプロセスを始めるには、まず関数リストに作成した関数を追加する必要があります。

- **NLFit ツール**

NLFit ツールはウィザード方式で、より複雑なフィット関数を定義し、フィットの工程をあらゆる可能な方法で制御することが出来ます。NLFit ツールで、ユーザ定義関数をフィットするには、まず、**フィット関数ビルダー** で関数を作成します。

このチュートリアルでは、主に**フィット関数ビルダー**でのフィット関数の作成の仕方を図解し、NLFit ツールを使って、カーブフィットに必要なパラメータを定義して、フィットを実行するかを説明します。

必要な Origin のバージョン: Origin 2016 SR0 以降

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- **フィット関数ビルダー**でフィット関数を作成する
- ユーザ定義フィット関数で非線形曲線フィットを実行する
- パラメーターを修正する

ステップ

<Origin EXE Folder>\Samples\Curve Fitting\ のパスにある、**ConcentrationCurve.dat** のデータを使ってフィットを実行します。

次の様にフィット関数は作成され使用されます。

$$y = A \exp(2.303kx - k_m) \sqrt{2.303 + \frac{C}{(x - C_0)}}$$

ここで、

y : 従属変数

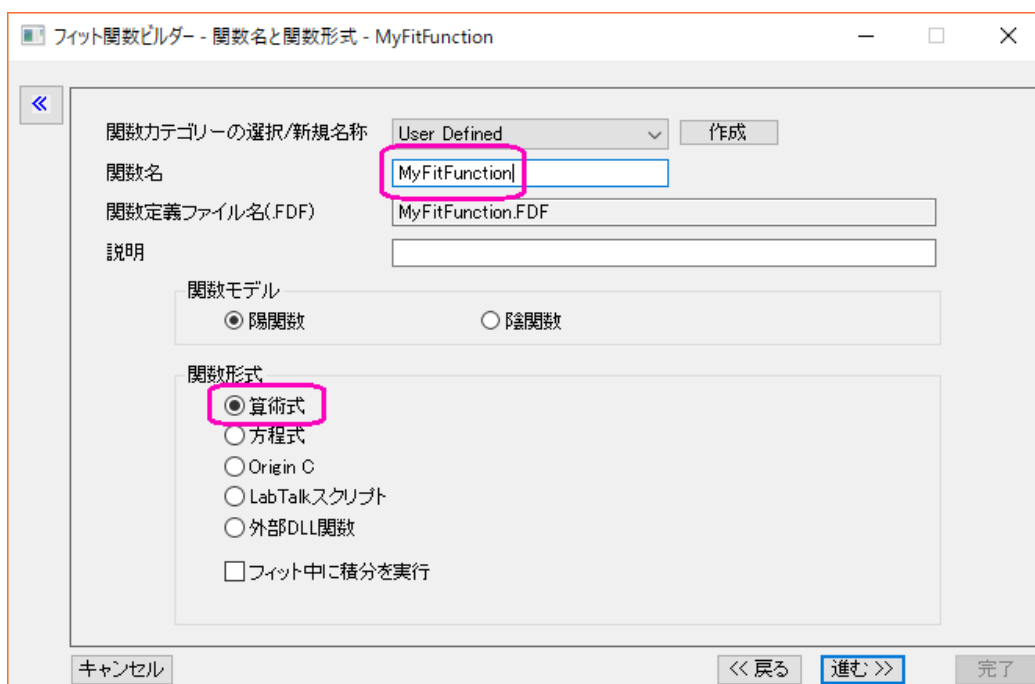
x : 独立変数

A, k_m, k, C, C_0 はすべてフィットパラメータです。

フィット関数を作成する

このセクションでは、**フィット関数ビルダー**でユーザ定義関数を作成する方法を説明します。他のツール、**フィット関数オーガナイザー**でも、ユーザ定義関数を作成することが出来ます。**ツール:フィット関数オーガナイザー**と選択、または **F9** をキーボードで押してダイアログを開きます。

1. Origin を起動し、**ツール:フィット関数ビルダー**を選択(または **F8** キーを押す)して、フィット関数ビルダを開きます。
2. **処理のゴールページ**で、**新しい関数の作成**を選択し、**進む**ボタンをクリックします。
3. **関数と関数形式**のページでは、下図のように設定を変更し、**進む**ボタンをクリックします。



4. 変数とパラメータページで、変数とパラメータ名を下図のように入力し、パラメータボックスの進む

をクリックします。区切りにはカンマ“,”を使います。

5. 式形式の関数ページで、以下の式を関数内容に入力します。

```
A*exp(R0*k*x-km)*sqrt(R0+c/(x-c0))
```

6. 定数タブを開き、R0 の値を 2.303 に設定します。

7. 予測された初期値を、このデータと関数に基づいたパラメータに与えます。

パラメータ	単位	意味	固定	初期値	有効桁数
A		?	<input type="checkbox"/>	325	System
km		?	<input type="checkbox"/>	10	System
k		?	<input type="checkbox"/>	1	System
c		?	<input type="checkbox"/>	2	System
c0		?	<input type="checkbox"/>	0.1	System

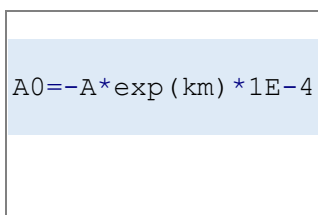
Note: フィット実行時に異なる初期値を入力することもできます。

8. 評価ボタン  をクリックして、関数が動作するか確認します（動作する場合、実際の y の値が返されます）。

Note: 最初の操作で、関数形式として **OriginC** を使用すると、この操作画面で関数をコンパイルして何かエラーがないか確認できます。これは特に括弧の合致を調べるのに便利です。

9. 進むを 3 度クリックして、派生パラメータページを開きます。

10. このページで、派生パラメータ **A0** を定義し、**派生パラメータ定義式**を入力します。



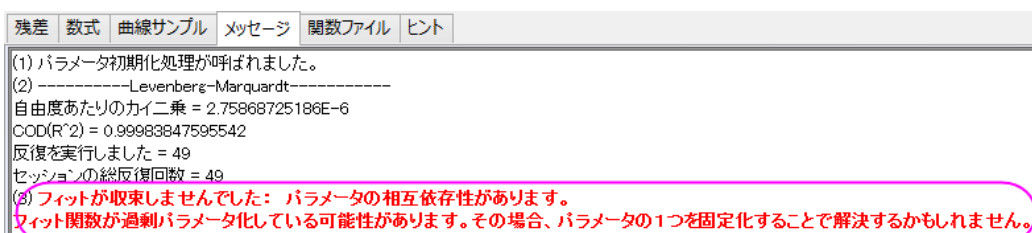
11. **完了** ボタンをクリックして関数の定義を終了します。関数ファイル(.fdf) は、ユーザファイルフォルダに保存されます。




フィット関数ビルダーを使用して一度定義した関数を、あとから編集することもできます(その場合、最初に表示される処理のゴールページでフィット関数の編集を選択)。また、**フィット関数オーガナイザ**を使用することもできます。






カーブフィットを実行する

1. ボタンをクリックして <Origin インストールフォルダ>\Samples\Curve Fitting\ にある **ConcentrationCurve.dat** をインポートします。
2. B 列を選択して ボタンをクリックし、散布図を作図します。
3. グラフウィンドウがアクティブ状態で、**解析:フィット:非線形曲線フィット...**メニューを選択し、**NLFit** ダイアログを開きます。
4. 関数選択のページのカテゴリを **User Defined** にし、関数を **MyFitFunc(User)** にします。
5. ボタンをクリックしてデータをフィットします。
6. **メッセージ** タブで、パラメータ過剰によりフィットが収束しなかったというエラーメッセージが表示されます。



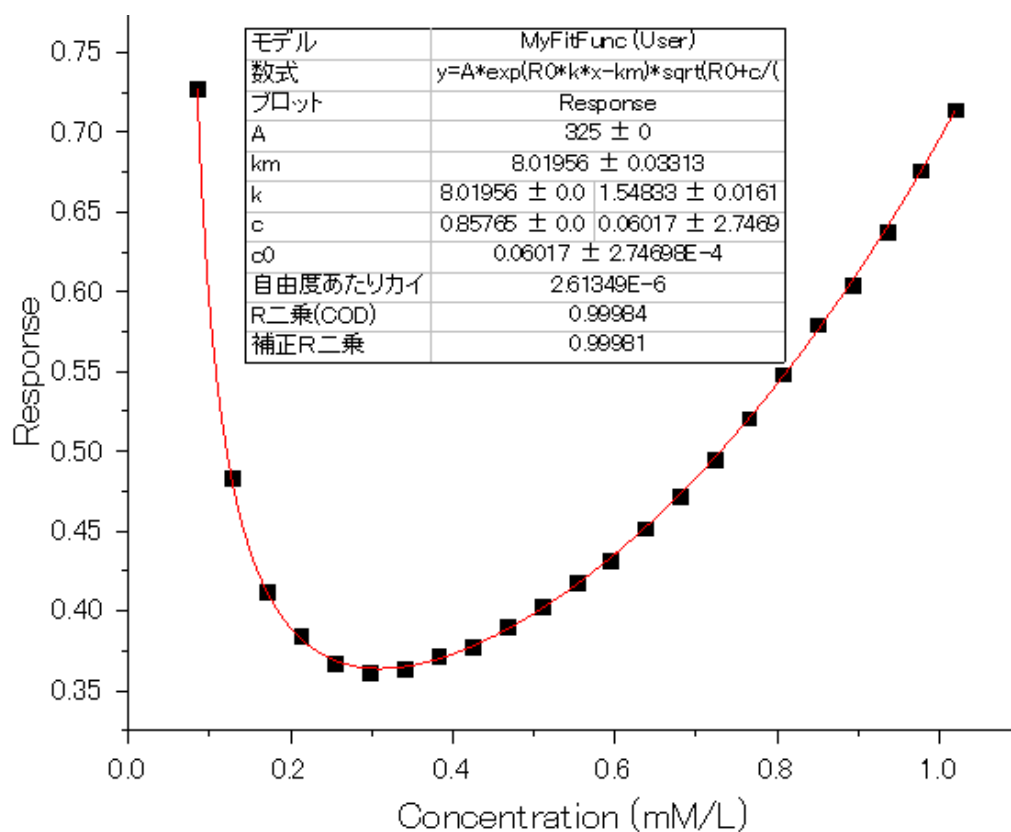
7. パラメータ A と km で、相互依存性を持っているため、どちらか 1 つを修正することでこの問題を解決します。ここでは **A** を修正します。

8. パラメータタブを開き、をクリックして初期値を呼び出します。パラメータ A の固定のチェックボックスにチェックを付けます。

ピーク番号	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
1	A	?	<input checked="" type="checkbox"/>	325	--	--	--	--	System 
1	km	?	<input type="checkbox"/>	10	--	--	--	--	System 
1	k	?	<input type="checkbox"/>	1	--	--	--	--	System 
1	c	?	<input type="checkbox"/>	2	--	--	--	--	System 
1	c0	?	<input type="checkbox"/>	0.1	--	--	--	--	System 

9. フィットボタンをクリックしてフィットを実行します。

10. グラフにはフィット曲線が追加されます。



11. また、結果レポートシートが作成され、すべてのパラメータ値(派生パラメータを含む)がパラメータ表に出力されます。

パラメータ

	値	標準誤差	t値	Prob> t	依存度
A	325	0	--	--	0
km	8.01956	0.03313	242.0676	0	0.99957
k	1.54833	0.01613	96.01794	0	0.99646
c	0.85765	0.06192	13.85121	2.21627E-11	0.9992
c0	0.06017	2.74698E-4	219.03971	0	0.84502
A0	-98.79498	3.27302			

自由度あたりのカイ二乗 = 2.61349318598E-6
 CDD(R²) = 0.99983847595542
 反復を実行しました = 70
 セッションの総反復回数 = 70
 フィットが収束しました: 1E-9のカイ二乗許容条件を満たしました。
 パラメータに値が固定されたものがあります
 標準誤差は補正カイ二乗値の平方根でスケールされています。
 A0は計算で導かれた派生パラメータです。
 定数: R0=1



パラメータ過剰が発生した場合、異なるパラメータを固定して複数のフィット結果を取得し、その後、**解析:フィット:モデルの比較**ツールにより統計的にフィットモデルを比較することができます。

1.



ユーザ定義関数で曲面フィット

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ステップ](#)
 - [3.1 曲面フィット関数を作成する](#)
 - [3.2 曲面フィットを実行する](#)

サマリー

曲面のフィットを行うために、Origin では**非線形曲面フィット**の機能を利用できます。組み込みの曲面フィット関数に加え、**フィット関数ビルダー**でユーザ自身でフィット関数を作成できます。

このチュートリアルでは、**フィット関数ビルダー**でのユーザ定義関数の作成方法と、**NLFit** ツールを使用した非線形曲面フィットの実行方法について紹介します。

必要な Origin のバージョン: Origin 2016 SR0 以降

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- **フィット関数ビルダー**で曲面フィット関数を作成する
- ユーザ定義フィット関数で非線形曲面フィットを実行する

ステップ

<Origin EXE Folder>\Samples\Curve Fitting\ のパスにあるデータ **PolynomialSurface.dat** 使ってフィットを実行します。次のフィット関数を作成し使用します。

$$z = z_0 + A_1x + A_3x^3 + B_1y + B_3y^3 + Cxy + C_2x^2y + C_3xy^2$$

ここで、

z : 従属変数

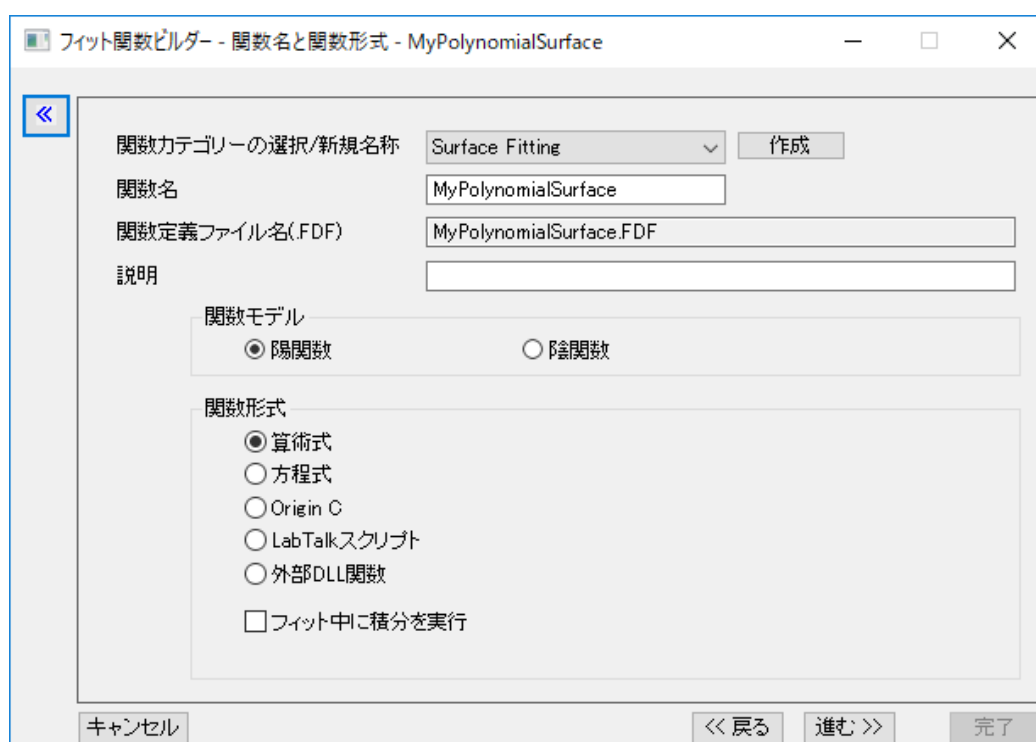
x および y は独立変数

$z_0, A_1, A_3, B_1, B_3, C, C_2, C_3$ はすべてフィットパラメータです。

曲面フィット関数を作成する

このセクションでは、**フィット関数ビルダー**を使用してユーザ定義の曲面フィット関数を作成する方法を説明します。もう一つのツール、**フィット関数オーガナイザー**でも、ユーザ定義の曲面フィット関数を作成することが出来ます。**ツール:フィット関数オーガナイザー** と選択、または **F9** をキーボードで押してダイアログを開きます。

1. Origin を起動し、**ツール:フィット関数ビルダー**を選択(または **F8** キーを押す)して、フィット関数ビルダを開きます。
2. **処理のゴールページ**で、**新しい関数の作成**を選択し、**進むボタン**をクリックします。
3. **関数名と関数形式**のページで、**関数カテゴリー**の選択を Surface Fitting にします。これは、**非線形曲面フィット**ツールでは、**Surface Fitting** カテゴリーにある関数しか使用できないためです。
4. **関数名**として、"MyPolynomialSurface"を入力し、**関数形式**を**算術式**にします。**進む**をクリックします。



5. 変数とパラメータページで、変数とパラメータ名を下図のように入力し、パラメータボックスの進む

フィット関数ビルダー - 変数とパラメータ - MyPolynomialSurface

独立変数: x,y

従属変数: z

パラメータ: z0,A1,A3,B1,B3,C,C2,C3

派生パラメータ:

定数:

ピーク関数

キャンセル << 戻る 進む >> 完了

をクリックします。区切りにはカンマ”,”を使います。

6. 式形式の関数ページで、以下の式を関数内容に入力します。

```
z0+A1*x+A3*x^3+B1*y+B3*y^3+C*x*y+C2*x^2*y+C3*x*y^2
```

7. 予測された初期値を、このデータと関数に基づいたパラメータに与えます。

フィット関数ビルダー - 式形式の関数 - MyPolynomialSurface


パラメータ	単位	意味	固定	初期値	有効桁数
z0		?	<input type="checkbox"/>	1	System
A1		?	<input type="checkbox"/>	1	System
A3		?	<input type="checkbox"/>	1	System
B1		?	<input type="checkbox"/>	1	System
B3		?	<input type="checkbox"/>	1	System
C		?	<input type="checkbox"/>	1	System
C2		?	<input type="checkbox"/>	1	System

関数式: $z = z0 + A1 * x + A3 * x^3 + B1 * y + B3 * y^3 + C * x * y + C2 * x^2 * y + C3 * x * y^2$

クイックチェック
x = 1 y = 1

キャンセル << 戻る 進む >> 完了




1. 実際にフィットを実行する前に、異なる初期値を与えることもできます。
2. 評価ボタン  をクリックして、関数が動作するか確認します（動作する場合、実際の y の値が返されます）。

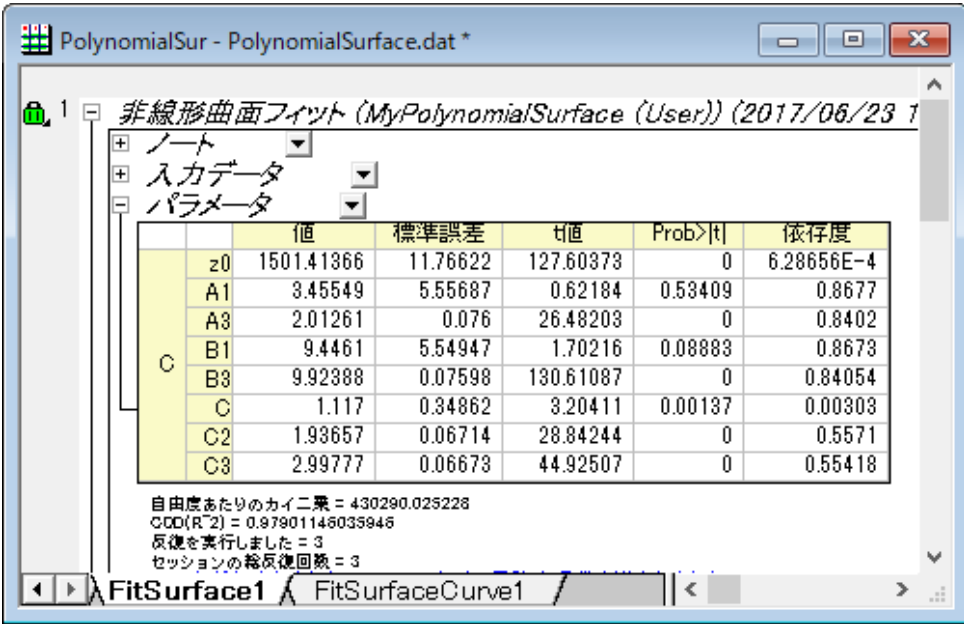
7. 完了ボタンをクリックして関数の定義を終了します。関数ファイル(.fdf) は、ユーザファイルフォルダに保存されます。



フィット関数ビルダーを使用して一度定義した関数を、あとから編集することもできます（その場合、最初に表示される処理のゴールページでフィット関数の編集を選択）。また、フィット関数オーガナイザを使用することもできます。

曲面フィットを実行する

1. 新しいワークブックを作成します。  ボタンをクリックして、<Origin EXE フォルダ>\Samples\Curve Fitting\のファイル **PolynomialSurface.dat** をインポートします。
2. 列 C で右クリックして、列 XY 属性の設定: Z を選択します。
3. ワークシートをアクティブにしたまま、解析: フィット: 非線形曲面(3D)フィット...メニューを選択し、NLFit ダイアログを開きます。
4. 関数選択のページで、カテゴリが **Surface** に設定され、読み取り専用になっていることがわかります。関数を **MyPolynomialSurface(User)** に設定します。
5. フィットボタンをクリックしてフィットを実行します。
6. 結果レポートシートが作成され、すべてのパラメータ値がパラメータ表に出力されます。元のワークブックには、ワークシート FitSurfaceCurve も追加されます。このシートには、フィット曲面のデータが入力されています。




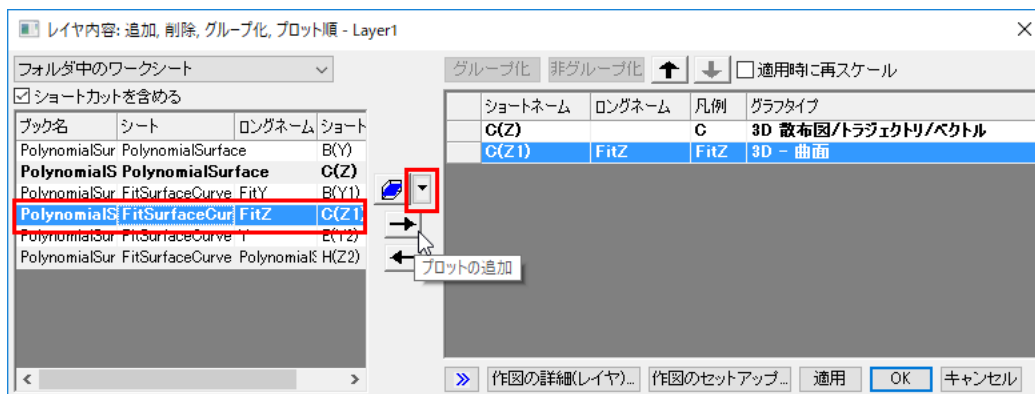
非線形曲面フィット (MyPolynomialSurface (User)) (2017/06/23 1)

	値	標準誤差	t値	Prob> t	依存度
z0	1501.41366	11.76622	127.60373	0	6.28656E-4
A1	3.45549	5.55687	0.62184	0.53409	0.8677
A3	2.01261	0.076	26.48203	0	0.8402
B1	9.4461	5.54947	1.70216	0.08883	0.8673
B3	9.92388	0.07598	130.61087	0	0.84054
C	1.117	0.34862	3.20411	0.00137	0.00303
C2	1.93657	0.06714	28.84244	0	0.5571
C3	2.99777	0.06673	44.92507	0	0.55418

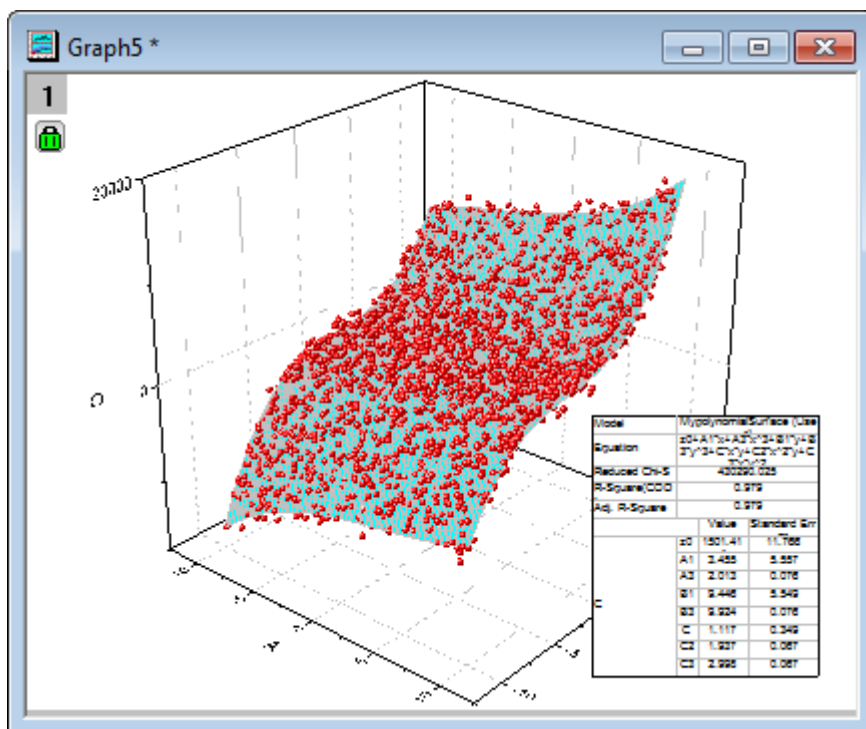
自由度あたりのカイ二乗 = 4.30290.025228
 COD(R²) = 0.97901146035946
 戻値を実行しました = 3
 セッションの総戻値回数 = 3

FitSurface1 / FitSurfaceCurve1

7. 元データのワークシートを開き、列 C を選択します。 ボタンをクリックして 3D 散布図を作成します。ソースデータにフィット曲面を追加するために、レイヤ 1 アイコンをダブルクリックします。レイヤ内容ダイアログが開いたら、左のドロップダウンリストからフォルダ内のワークシートを選択します。FitSurfaceCurve1 の FitZ を選択し、グラフタイプを **3D - 曲面** に変更して右パネルに追加します。下の右矢印をクリックして、データセットを右のパネルに追加します。



OK をクリックして曲面を追加します。



Note:

Origin 2016 以降のバージョンでは、[Polynomial Surface Fit App](#) を利用可能です。多項式曲面をフィットしたい場合、このアプリを試すことをお勧めします。

あるデータセットを別のデータセットの関数としてフィットする

サマリー

出力が以下のように 1 または複数のデータセットで構成される「データセットフィッティング」を実行したい場合があります。

$$Output = A_1 * Dataset_1 + A_2 * Dataset_2$$

例えば、合成されたスペクトルを分析して、個々のスペクトルの比率を求めたいような場合です。これは、複数の独立変数を定義するか、フィット関数内で組合せを計算することで行うことができます。

必要な Origin のバージョン:8.0 SR6

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- 「データセットフィッティング」を実行する
- 複数の独立変数のフィット関数を定義する

ステップ

Samples\Curve Fitting フォルダから *Composite Spectrum.dat* ファイルをインポートします。このサンプルデータをみると、列 A がインデックス、列 B と列 C が成分 A と成分 B に関するスペクトルである事が分かります。列 D は成分 A と成分 B の複合スペクトルの構成物を読み取った後の値が入力されます。純物質から算出された列 B と列 C の関数で列 D をフィットすれば、列 B と列 C の構成要素にかかる係数(便宜上、c1 と c2 と呼びます)を算出できます。(Note: この場合、独立変数と従属変数は同じ数であると仮定します。そうでない場合、補間が必要です。)

フィット関数オーガナイザを開き、新しいフィット関数を定義します。

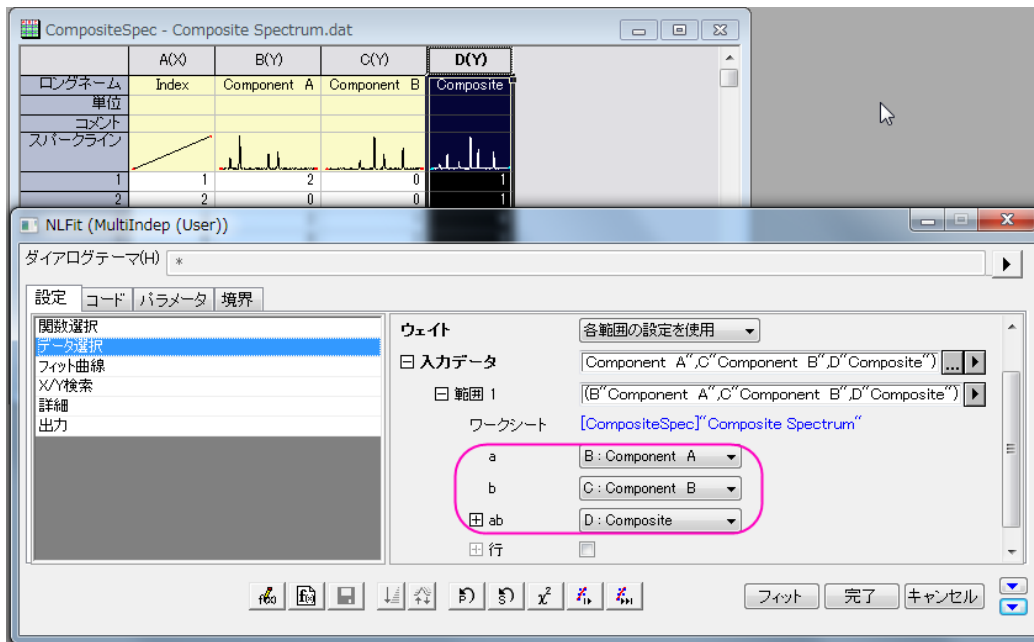
関数名:	MultIndep
実現方式:	ユーザ定義
独立変数:	a, b
従属変数:	ab
パラメータの名前:	C1, C2
定義形式:	Origin C
関数:	ab = C1*a + C2*b;

パラメータ初期化編集ボックスに C1 と C2 を初期化するため、次の値を入力します。

C1=1;

C2=1;

フィット関数を保存してフィット関数オーガナイザを閉じます。列 D だけを選択し、NLFit ダイアログを開き、次のようにデータ選択ページで入力データセットを指定します。



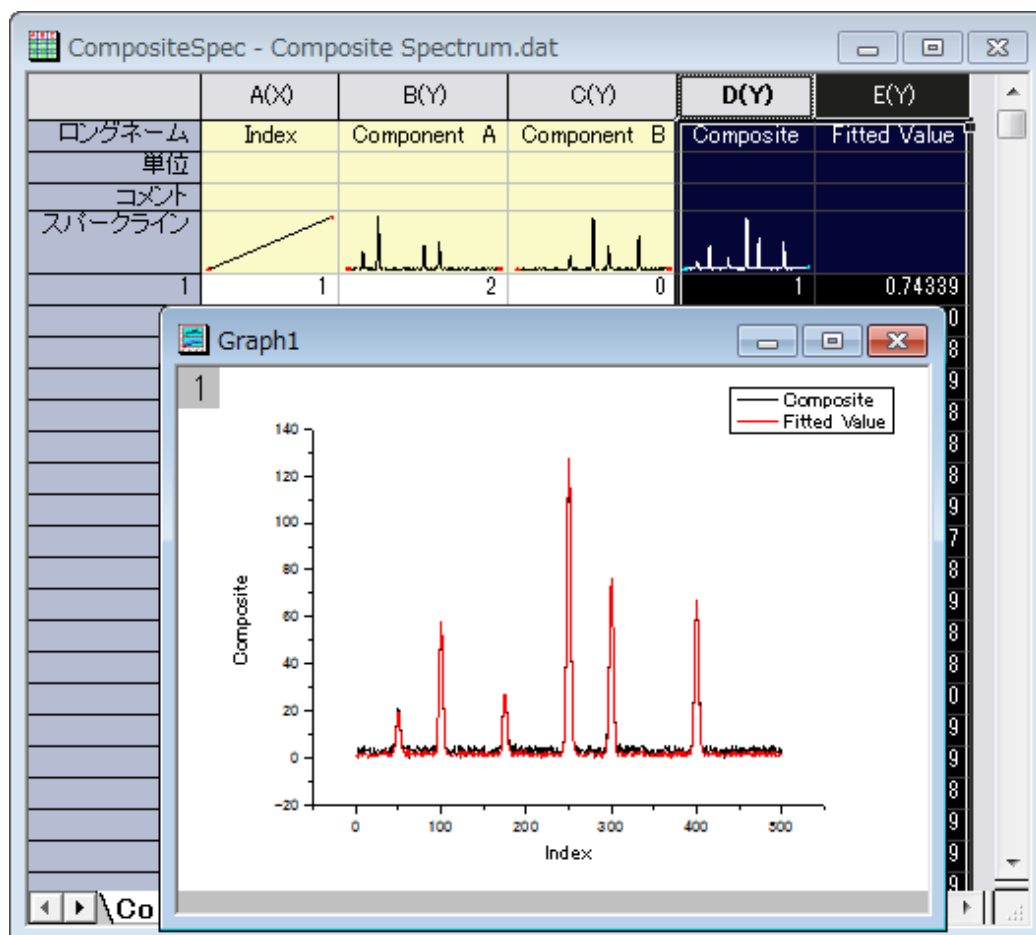
そして、フィットボタンをクリックして、結果を求めます。

結果

以下のような結果を得ることができます。

	値	標準誤差
C1	0.37169	0.00483
C2	0.66469	0.0047

フィット結果を確認するには、新しい列を追加し、そこに *FitNLCurve1* というワークシートにあるフィットした Y からフィット値をコピー＆ペーストします。そして、*Composite* とフィットデータを選択し、折れ線グラフをプロットし、どの程度良くフィットしているかを見ます。



複数の独立変数でフィットする

サマリー

「関数オーガナイザ」ツールは、1以上の独立変数または従属変数を持つユーザ定義関数を作成するのに使われます。そして、NLFitダイアログを使って、データをフィットします。フィットダイアログのプレビューウィンドウは、1つの変数に対して別の変数をプロットすることができますが、もしプレビューの表示でまだフィットが不十分な場合、フィット処理は1回だけ行われ、パラメータに値がセットされます。

次のような数式（

$y = A_0 + A_1 * x_1 + A_2 * x_2 + \dots$ ）で複数の独立変数でフィットを行いたい場合、非線形曲線フィットではなく、線形重回帰を使用することをお勧めします。

必要な Origin のバージョン: 8.0 SR6

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- 2つの独立変数と1つの従属変数を持つユーザ定義関数を作成する

- NLFitを使ってその関数でフィットする

ステップ

1. 新しいワークブックを開き、*Samples\Curve Fitting\Activity.dat* ファイルをインポートします。
2. メニューから「ツール:フィット関数オーガナイザ」を選択(または **F9** を押す)し、**フィット関数オーガナイザ**を開き、**NewCategory** カテゴリー(カテゴリーが無ければ作成)に **Multilndep** という名前の新しい関数を次のように定義します。

関数名: Multilndep

実現方式: ユーザ定義

独立変数: substr,inhib

従属変数: act

パラメータの名前: ki,km,vm

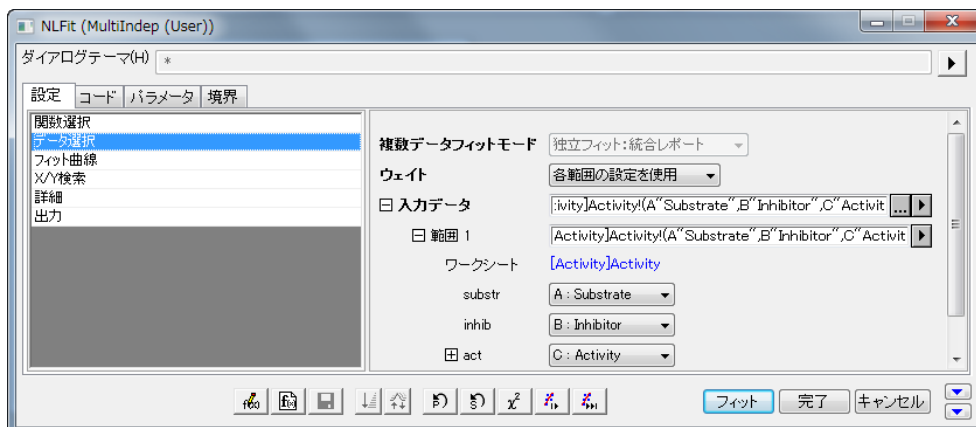
定義形式: Origin C

関数:

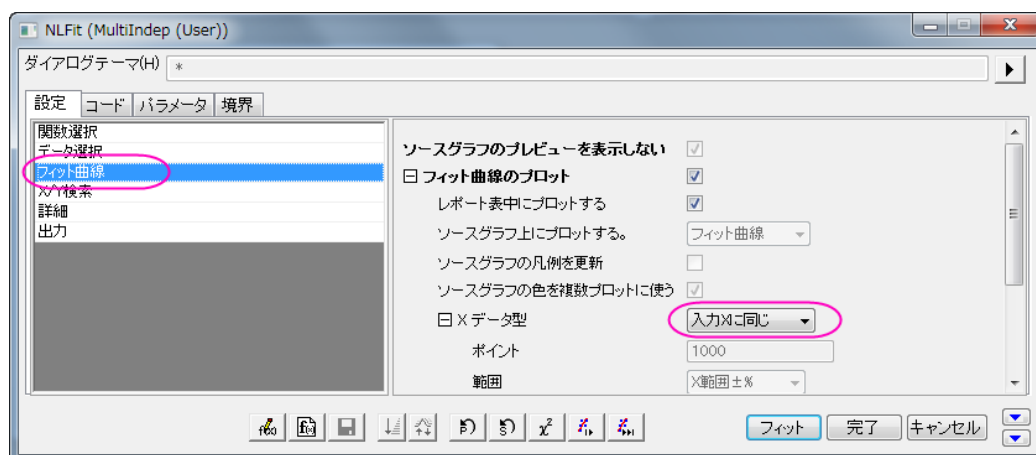
$$\text{double mix} = \text{inhib} / \text{ki};$$

$$\text{act} = \text{vm} * \text{substr} / (\text{km} + (1 + \text{mix}) * \text{substr});$$

3. **NOTE:**OriginC を使用しているので定義名と関数定義内で使用されている形式(大文字と小文字の違いなど)に注意しなければなりません。例:Substr と substr は違うものです。
4. 「保存」をクリックして関数を保存し、OK をクリックして、オーガナイザを終了します。
5. ユーザ定義関数についての詳細は、Origin C を使ったユーザ定義関数をご覧ください。
6. ワークシートの列 C だけを選択し、**解析: フィット: 非線形曲線フィット**と操作して NLFit ダイアログを開きます。「**設定:関数選択**」ページで、**NewCategory** カテゴリーにある **Multilndep** 関数を選択します。次のように、**データ選択** ページで入力データセットをセットします。



7. 「フィット曲線」ページを選択し、「フィット曲線のプロット」ブランチを開きます。そして、「X データタイプ」の隣にあるドロップダウンリストから「入力 X に同じ」を選択します。



8. 「パラメータ」タブを選択し、初期値を次のようにセットします。

設定 コード パラメータ 境界

パラメータの自動初期化を行う
セルをダブルクリックして演算子を変更します。他の:

ピーク番号	パラメータ	意味	固定	値	誤差
1	ki	?	<input type="checkbox"/>	0.01	--
1	km	?	<input type="checkbox"/>	1	--
1	vm	?	<input type="checkbox"/>	100	--

9. 「フィット」ボタンをクリックし、フィットレポートを生成します。レポートワークシートから次のようにこれらの結果を見ることができます。

パラメータ

		値	標準誤差
Activity	ki	0.0373	0.00233
	km	7.30567	0.71748
	vm	653.1116	22.39698

統計

	Activity
ポイント数	18
自由度	15
自由度あたりカイ二乗	155.36102
残差平方和	2330.41531
補正R二乗	0.98357
フィット状況	成功(100)

統計の表より、フィットはまずまずの成果であったと見ることができます。

GNU Scientific Library を使ったユーザ定義フィット関数

GSL 関数をフィット関数として使用する方法を説明したものです。

必要な Origin のバージョン:8.0 SR6

1.次の関数で、下にあるサンプルデータをフィットします。

$$y = y_0 + a \int_0^x e^{\beta \cdot t} dt$$

```
0.1      0.10517
0.2      0.2214
0.3      0.34986
0.4      0.49182
0.5      0.64872
0.6      0.82212
0.7      1.01375
0.8      1.22554
0.9      1.4596
1         1.71828
1.1      2.00417
1.2      2.32012
1.3      2.6693
1.4      3.0552
1.5      3.48169
1.6      3.95303
1.7      4.47395
1.8      5.04965
1.9      5.68589
2         6.38906
2.1      7.16617
2.2      8.02501
2.3      8.97418
2.4      10.02318
2.5      11.18249
2.6      12.46374
2.7      13.87973
2.8      15.44465
2.9      17.17415
3         19.08554
3.1      21.19795
3.2      23.53253
```

2.次のステップに進む前に、Origin をインストールしたフォルダのユーザファイルフォルダに ocgsl.h ファイルを追加します。同じ場所に、Calling GNU Scientific Library から gsl_dll ファイルをコピーしてください。

ocgsl.h

```
#pragma dll(libgsl, header)
// これは OC の特別なプラグマ で、
// ヘッダキーワードは libgsl.dll がこのファイルと同じ場所にあることを示しています。

#define GSL_EXPORT          // OC では、これは不要ですので、削除します。
```

//gsl 関数のプロトタイプをここで直接探すことができます。

```
typedef double (* FUNC)(double x, void * params);

struct gsl_function_struct
{
    FUNC function;
    void * params;
};

typedef struct gsl_function_struct gsl_function ;

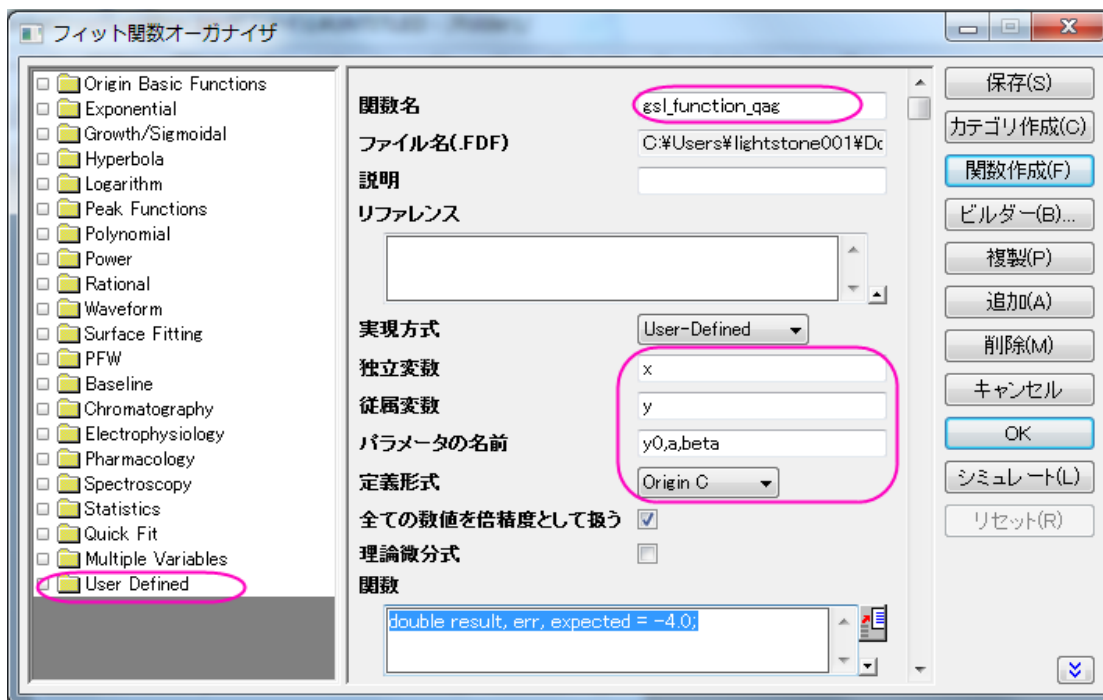
typedef struct
{
    size_t limit;
    size_t size;
    size_t nrmax;
    size_t i;
    size_t maximum_level;
    double *alist;
    double *blist;
    double *rlist;
    double *elist;
    size_t *order;
    size_t *level;
}
gsl_integration_workspace;

GSL_EXPORT gsl_integration_workspace *gsl_integration_workspace_alloc (const
size_t n);

GSL_EXPORT void gsl_integration_workspace_free (gsl_integration_workspace * w);

GSL_EXPORT int gsl_integration_qag (const gsl_function * f,
double a, double b,
double epsabs, double epsrel, size_t limit,
int key,
gsl_integration_workspace * workspace,
double *result, double *abserr);
```

3.F9を押し、フィット関数オーガナイザを開き、以下のように新しい関数を定義します。



4. 関数フィールドの右側にあるボタンをクリックし、コードビルダを開き、以下のコードを追加して、`_nlfgsl_integration_qag.fit` をコンパイルします。

```
#include "..\ocgsl.h"

static double f_callback(double x, void * params)
{
    double alpha = *(double *)params;
    return exp(alpha*x);
}

void _nlsgsl_integration_qag(
// フィットパラメータ
double y0, double a, double beta,
// 独立変数:
double x,
// 従属変数:
double& y)
{
    // 編集可能部分開始
    double result, err, expected = -4.0;

    // 1000 個の倍精度の間隔を持つことができるワークスペースを確保します。
    // それらの積分結果とエラーを推定します。
    gsl_integration_workspace *ww = gsl_integration_workspace_alloc(1000);

    gsl_function F;
    F.function = f_callback;
    F.params = &beta ;

    // 積分範囲 (0, x), は求められている絶対エラー 0
    // から、相対エラー 1e-7 間にあります
    gsl_integration_qag(&F, 0, x, 0, 1e-7, 1000, 0, ww, &result, &err);
}
```

```

// ワークスペース w に関係したメモリが解放されます
gsl_integration_workspace_free (ww);

y = y0 + a*result;

// 編集可能部分終了
}

```

さらに、以下のコードを追加すればフィット関数は完璧です。

```

//-----
//
#include <ONLSF.h>
#include "..\ocgsl.h"

static double f_callback(double x, void * params)
{
    double alpha = *(double *)params;
    return exp(alpha*x);
}

void _nlsfgsl_integration_qag(
// フィットパラメータ
double y0, double a, double beta,
// 独立変数:
double x,
// 従属変数:
double& y)
{
    // 編集可能部分開始

    NLFitContext *pCtxt = Project.GetNLFitContext();
    if ( pCtxt )
    {
        static vector vInteg;
        NLSFCURRINFO    stCurrInfo;
        pCtxt->GetFitCurrInfo(&stCurrInfo);
        int nCurrentIndex = stCurrInfo.nCurrDataIndex;

        BOOL bIsNewParamValues = pCtxt->IsNewParamValues();
        if ( bIsNewParamValues )
        {
            vector vx;
            pCtxt->GetIndepData(&vx);
            int nSize = vx.GetSize();
            vInteg.SetSize(nSize);

            // 1000 個の倍精度の間隔を持つことができるワークスペースを確保しま
            // それらの積分結果とエラーを推定します。
            gsl_integration_workspace *ww =
gsl_integration_workspace_alloc(1000);

```

```

gsl_function F;
F.function = f_callback;
F.params = &beta ;

double result, err, expected = -4.0;
for(int ii=0; ii<nSize; ++ii)
{
    // 積分範囲(0, vx[ii]), は求められている絶対エラー0
    // から、相対エラー1e-7 間にあります
    gsl_integration_qag(&F, 0, vx[ii], 0, 1e-7, 1000,
0, ww, &result, &err);
    vInteg[ii] = result;
}

// ワークスペース w に関するメモリが解放されます
gsl_integration_workspace_free (ww);

}

y = y0 + a*vInteg[nCurrentIndex];
x;
}

// 編集可能部分終了
}

```

5. 次の初期化コードを追加します。

パラメータ初期化

```

//パラメータを初期化するコード
sort( x_y_curve );
double coeff[2];
fitpoly( x_y_curve, 1, coeff);
a = coeff[0];
y0 = coeff[1];
beta=1.0

```

6. ユーザ定義関数 `gsl_integration_qag` を使ってフィットすると、以下の結果が得られます。

y0 = -1.06363E-6

a = 1

beta =1



NAG 特殊関数でフィットする

サマリー

Origin で、NAG 特殊関数を使った Origin C フィット関数を定義することができます。特殊関数を評価するのに NAG ルーチン を呼ぶことができます。

必要な Origin のバージョン:8.0 SR6

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- フィット関数オーガナイザでフィット関数を作成する
- NAG 特殊関数を使ったフィット関数を作成する

サンプルとステップ

次のモデルをフィットします。

$$inorm = A * \exp(-td/2.0/(t - t0)) * (I0(td/2.0/(t - t0)) + I1(td/2.0/(t - t0)))$$

この場合、 A 、 td 、 $t0$ はデータをフィットすることで求めるモデル用のパラメータです。そして、 $I0$ と $I1$ は、それぞれ次数 0 と次数 1 の第一種修正ベッセル関数です。このサンプルでは、このチュートリアルの最後にあるサンプルデータを使用します。フィットの手順は、次のステップに沿って行います。

F9 を押し、**フィット関数オーガナイザ**を開き、**FittingWithNAGSpecialFunc** という名前の新しいカテゴリを作成します。この新しいカテゴリに、新しいフィット関数 **FittingWithBessel** を以下のように定義します。

関数名: FittingWithBessel

実現方式: ユーザ定義

独立変数: t

従属変数: inorm

パラメータの名前: A,t0,td

定義形式: [Origin C](#)

関数:

「関数」ボックスの近くにあるボタン(アイコン)をクリックしてコードビルダを開き、次のようにフィット関数を定義して、コンパイルします。

```
#include <origin.h>
// ここに include ファイルを追加します。
// 例えば、NAG ライブラリからの関数でフィットする場合、
// ここに NAG 関数のヘッダファイルを追加します。
#include <oc_nag8.h>

// このファイルに定義したい他の Origin C 関数に対するコードをここに追加し、
// フィット関数でアクセスできるようにします。
```

```
// 他のファイルがワークスペースにロードされ、コンパイルされていれば、そのファイルで定義されている
// C 関数にアクセスでき、関数は上記でインクルードしたヘッダファイルに
// プロトタイプがあります。

// 関数コード内で NLSF オブジェクトのプロパティとメソッドにアクセスできます。

// 関数の定義には、C 言語のシンタックスを使います。
// 例えば、パラメータ名が P1 の場合、関数定義に p1 と使うことはできません。
// 分数を使用する場合には、1/2 のような整数の除算は 0 になり、0.5 ではありません。
// 正しい値にするには、0.5 または 1/2.0 を使います。

// より詳細な情報およびサンプルは、Origin ヘルプファイルの「ユーザ定義フィット関数」
// を参照してください。

//-----
//
void _nlsfFittingWithBessel(
// フィットパラメータ:
double A, double t0, double td,
// 独立変数:
double t,
// 従属変数:
double& inorm)
{
    // 編集可能部分の開始
    //inorm= A* exp(-td/2.0/(t-t0)) * ( s18aec(td/2.0/(t-
t0),NAGERR_DEFAULT)+s18afc(td/2.0/(t-t0),NAGERR_DEFAULT)
);

    static NagError fail1;
    static NagError fail2;
    double dtemp = td/2.0/(t-t0);
    inorm= A* exp(-dtemp) * ( s18aec(dtemp,&fail1)+s18afc(dtemp,&fail2) );
    if(fail1.code !=NE_NOERROR)
        printf("%s\n",fail1.message);
    if(fail2.code !=NE_NOERROR)
        printf("%s\n",fail2.message);

    // 編集可能部分の終了
}

```

関数をシミュレーションする

関数本体のコードを入力したら、コードビルダの「コンパイル」ボタンをクリックして、シンタックスにエラーがないかチェックすることができます。そして、「ダイアログに戻る」ボタンをクリックして、フィット関数オーガナイザダイアログボックスに戻ります。「保存」ボタンをクリックして、FDF ファイル(関数定義ファイル)を生成します。

FDF ファイルがあれば、「シミュレート」ボタンをクリックして、曲線のシミュレーションを行うことができ、これは初期値を求めるのに役立ちます。「simcurve」ダイアログで、適切なパラメータ値や X 範囲を入力すると、「プレビュー」パネルに曲線がどのように表示されるのかが表示されます。

パラメータの初期値をセットする

これはユーザ定義のフィット関数なので、データのフィットを実行する前に、パラメータの推定初期値を与える必要があります。「非線形曲線」フィットダイアログの「パラメータ」タブで手動でセットすることができます。以下のサンプルデータで示す内容では、パラメータの初期値を $A = 1$, $t_d = 1$, $t_0 = 1$ のようにセットします。パラメータが初期化されると、サンプルデータの右側で示すようにフィットを実行して、フィット結果を取得することができます。

サンプルデータ

以下のサンプルデータをコピーし、インポートウィザードを使用してクリップボードからデータをインポートします。そして、指定の初期値を使ってパラメータの設定を行ってください。 $A = 1$, $t_d = 1$, $t_0 = 1$ 。

サンプルデータ		Results	
X	Y		
2	0.7868954118		
2.080808081	0.8133022141		
2.161616162	0.8178216765		
2.242424242	0.8427866729		
2.323232323	0.8315815363		
2.404040404	0.8484657180		
2.565656566	0.8618233553		
2.646464646	0.8745962570		
2.727272727	0.8921620316		
2.808080808	0.8687399759		

パラメータ		値	標準誤差
Y	A	0.96431	0.06562
	t0	1.39545	0.40134
	td	0.53711	0.54076

自由度あたりのカイニ乗 = 1.02442755048E-4
 COD(R²) = 0.92247024814828
 反復を実行しました = 11
 セッションの総反復回数 = 11
 フィットが収束しました: 許容条件を満たしました。



NAG ライブラリを使ってパラメータ制限がある積分関数をフィットする

サマリー

このチュートリアルを始める前に、NAG ライブラリを使った積分フィットを読むことをお勧めします。そして、プログラミングに関する部分については、2つのチュートリアルは基本的に同じで、異なる点は、ここでは積分制限を持つフィットパラメータでの Origin C のフィット関数を定義することを学びますが、前のチュートリアルでは、積分制限での独立変数を定義します。また、ここでは別の NAG 積分関数が使われています。

必要な Origin のバージョン: 8.0 SR6

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- NAG の積分ルーチンを使って、定積分でのフィット関数を作成します。
- パラメータの積分制限を持つフィット関数を作成します。
- log 関数を使って、フィット関数から大きな戻り値のスケールに合わせます。

サンプルとステップ

例えば、次のモデルを使って、このページの一番下にある [サンプルデータ](#) をフィットしましょう。

$$y = \int_c^d \frac{\cosh((x_i + b^2 \cdot x^2)/(b + x))}{a + (x_i^2 + x^2)} dx_i$$

x_i を使って積分の独立変数を示していますが、 x はフィッティングの独立変数を示していることに注意して下さい。モデルのパラメータ a, b, c, d は、サンプルデータから取得したいフィットパラメータです。データを準備するには、サンプルデータを Origin のワークシートにコピーする必要があります。フィットの手順は、前のチュートリアルと同じように行います。

フィット関数オーガナイザでフィット関数を定義する

F9 を押して、フィット関数オーガナイザを開き、最初のチュートリアルと同様に、ユーザ定義の積分フィット関数 `nag_integration_fitting_cosh` をカテゴリ `FittingWithIntegral` に追加します。

関数名: nag_integration_fitting_cosh

実現方式: ユーザ定義

独立変数: x

従属変数: y

パラメータの名前: a, b, c, d

定義形式: Origin C

関数:

「関数」ボックスの近くにあるボタン(アイコン)をクリックしてコードビルダを開き、次のようにフィット関数を定義して、コンパイルします。(Note:コンパイル後に関数を保存して関数オーガナイザダイアログに戻る事を忘れないでください。)

```
#include <origin.h>
// ここに include ファイルを追加します。
// 例えば、NAG ライブラリからの関数でフィットする場合、
// ここに NAG 関数のヘッダファイルを追加します。
#include <oc_nag8.h>

// このファイルに定義したい他の Origin C 関数に対するコードをここに追加し、
// フィット関数でアクセスできるようにします。
struct user
{
    double a, b, fitX; // fitX はフィット関数の独立変数です。
};
static double NAG_CALL f_callback(double x, Nag_User *comm) // x は被積分関数の独立変数です。
{
    struct user *sp = (struct user *) (comm->p);
```

```

double aa, bb, fitX; // 一時変数として Nag_User 通信構造体のパラメータとして受け入
れます
aa = sp->a;
bb = sp->b;
fitX = sp->fitX;

return cosh((x*x+bb*bb*fitX*fitX)/(bb+fitX))/(aa+(x*x+fitX*fitX));
}

// 他のファイルがワークスペースにロードされ、コンパイルされていれば、
// そのファイルで定義されている C 関数にアクセスでき、関数は上記でインクルードした
// ヘッダファイルにプロトタイプがあります。

// 関数コード内で NLSF オブジェクトのプロパティとメソッドにアクセスできます。

// 関数の定義には、C 言語のシンタックスを使います。
// 例えば、パラメータ名が P1 の場合、関数定義に p1 と使うことはできません。
// 分数を使用する場合には、1/2 のような整数の除算は 0 になり、0.5 ではありません。
// 正しい値にするには、0.5 または 1/2.0 を使います。

// より詳細な情報およびサンプルは、Origin ヘルプファイルの「ユーザ定義フィット関数」
// を参照してください。

//-----
//
void _nlsfnag_integration_fitting(
// フィットパラメータ:
double a, double b, double c, double d,
// 独立変数:
double x,
// 従属変数:
double& y)
{
// 編集可能部分の開始
double epsabs = 0.00001, epsrel = 0.0000001, result, abserr;
Integer max_num_subint = 500;
// epsabs と epsrel、およびこの値を使って必要な精度に向上できるので、
// 必要な積分の精度を制御できます。

Nag_QuadProgress qp;
static NagError fail;

// integrand のパラメータを初期化するのに call_back 関数を利用でき、
// 上記を行うには Nag_User 通信構造体を通して行います。
Nag_User comm;
struct user s;
s.a = a;
s.b = b;
s.fitX = x;
comm.p = (Pointer)&s;

d01sjc(f_callback, c, d, epsabs, epsrel, max_num_subint, &result, &abserr,
&qp, &comm, &fail);

```

```

// エラーメッセージを出力することで、エラーを調査するには、以下の行のコメントを解除しま
す。
// if (fail.code != NE_NOERROR)
// printf("%s\n", fail.message);

// 次の3つのエラー以外は、入力パラメータが不正であるか
//アロケーションエラーに当たります: NE_INT_ARG_LT NE_BAD_PARAM
NE_ALLOC_FAIL
// メモリーリークを避けるため、積分ルーチンを呼ぶ前にメモリのアロケーションを
// 解放する必要があります。
if (fail.code != NE_INT_ARG_LT && fail.code != NE_BAD_PARAM &&
fail.code != NE_ALLOC_FAIL)
{
    NAG_FREE(qp.sub_int_beg_pts);
    NAG_FREE(qp.sub_int_end_pts);
    NAG_FREE(qp.sub_int_result);
    NAG_FREE(qp.sub_int_error);
}

y = log(result);
// 積分の対数結果を返すのは容量が大きくなることもあるので、
// 必ずしも行う必要はありません

// 編集可能部分の終了
}

```

上記のコードでは、フィット関数 `_nlsfnag_integration_fitting_cosh` の本体の外側で被積分関数をコールバック関数 `f_callback` として定義しています。被積分関数を変数 `a`, `b`, `fitX` でパラメータ化し、それらを `Nag_User` 構造体を使ってコールバック関数に渡します。その後、NAG 積分ルーチン `d01sjc` を使って、積分を実行します。上記以外にも求積ルーチンを希望に合わせて利用する事ができます。現在のサンプルでは、フィット関数に対数スケールを使います。(サンプルデータは、既に対数関数でスケールリングされています。)

コードをコンパイルし、ダイアログに戻り、フィット関数オーガナイザでフィット関数を保存し、「解析:フィット」メニューから「非線形曲線フィット」ダイアログを開きます。そして、「設定」タブの「関数選択」ページで、このユーザ定義のフィット関数を選択することができます。

パラメータの初期値をセットする

ユーザ定義のフィット関数なので、パラメータの初期値を指定する必要があります。非線形曲線フィットダイアログの「パラメータ」タブで手動でセットすることもできます。今回の例では、パラメータの初期値を $a = 1$, $b = 10$, $c = 3$, $d = 4$ のようにセットします。パラメータが初期化されると、以下に示すようにフィットを実行して、フィット結果を取得することができます。

サンプルデータ

サンプルデータ		結果
X	Y	
-5	498.19046	
-4.33333	329.43196	
-3.66667	210.28005	
-3	126.55799	
-2.33333	69.01544	
-1.66667	31.3555	
-1	9.1393	
-0.33333	-0.84496	
0.33333	-0.99914	
1	6.86736	

	値	標準誤差
a	0.99303	0.06577
b	10	5.3108E-5
c	3.00083	0.0062
d	4.00022	9.38713E-4



NAG ライブラリを使った積分フィット

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 サンプルとステップ](#)
 - [3.1 関数を定義する](#)
 - [3.2 パラメータの初期値または初期化コードを設定する](#)
 - [3.3 関数をシミュレーションする](#)
 - [3.4 曲線をフィットする](#)

サマリー

Origin で、積分を求める Origin C フィット関数を定義することができます。NAG 関数を呼び出し、積分を実行するようにフィット関数を定義します。積分を実行する組込の Origin C 関数があります。ここでのサンプルでは、NAG 関数を使用する方法を

お薦めします。組込の積分のアルゴリズムに比べ、パフォーマンスが優れているためです。ここでは有限 NAG 統合が使用されています。

必要な Origin のバージョン:8.0 SR6

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- フィット関数オーガナイザでフィット関数を作成する
- NAG の積分ルーチンを使って、定積分でのフィット関数を作成する
- フィット関数の初期化コードをセットアップする

サンプルとステップ

次のモデルをフィットします。


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

ここで y_0 , A , x_c および w は、データフィットから取得したいモデルのパラメータです。フィットの手順は、次のステップに沿って行います。

関数を定義する

F9 を押し、フィット関数オーガナイザを開き、*FittingWithIntegral* という名前の新しいカテゴリを作成します。このカテゴリに、新しいフィット関数 *nag_integration_fitting* を以下のように定義します。

関数名:	nag_integration_fitting
実現方式:	ユーザ定義
独立変数:	x
従属変数:	y
パラメータの名前:	y0, A, xc, w
定義形式:	Origin C
関数:	

関数ボックスの近くにある  ボタンをクリックしてコードビルダを開き、次のように操作します。

1. スクロールして次の行まで移動します。

```
//add the header file for the NAG functions here.
```

そして、以下のコードをこの行の下に貼り付けます。

```
#include <oc_nag8.h>
```

2. 次の行まで行きます。

```
// and access in your fitting function.
```

そして、以下のコードをこの行の下に貼り付けます。

```
struct user // 被積分関数のパラメータ
{
    double amp, center, width;
};
// ユーザによって定義された関数は、与えられた x で被積分関数の値を返します。
static double NAG_CALL f_callback(double x, Nag_User *comm)
{
    struct user *sp = (struct user *) (comm->p);

    double amp, center, width; // Nag_User 構造体でのパラメータを受け付け
    // 一時的な変数
    amp = sp->amp;
    center = sp->center;
    width = sp->width;

    return amp * exp( -2*(x - center)*(x - center)/width/width ) /
    (width*sqrt(PI/2));
}
```

3. 次の行まで行きます。

```
// Beginning of editable part.
```

そして、以下のコードをこの行の下に貼り付けます。

```
// epsabs は絶対精度、epsrel および max_num_subint は相対精度であり、

// 必要な積分の精度を制御できます。
// epsrel が負にセットされている場合、絶対精度が使われます。
// 同様に、epsabs を負にセットすることで、相対精度のみを制御することもできま
す。
double epsabs = 0.0, epsrel = 0.0001;
// 積分で関数を評価するのに必要な sub-intervals の最大数
// より複雑な被積分関数になると、max_num_subint も大きくなります。
// ほとんどの問題に対しては、200 から 500 くらいが適切であり、お薦めです。
Integer max_num_subint = 200;

// 結果はアルゴリズムによって返される適切な積分値を持ちます。
// abserr は、|I - result| に対する上側境界であるエラーの推測です。
// ここで、I は整数値です。
double result, abserr;

// Nag_QuadProgress の構造体
// これには、max_num_subint 要素への内部的なメモリアロケーションへのポインタ
が含まれます。
Nag_QuadProgress qp;

// NAG エラーパラメータ (構造体)
static NagError fail;

// Nag_User 構造体によって、パラメータが被積分関数に渡されます。
Nag_User comm;
struct user s;
    s.amp = A;
    s.center = xc;
    s.width = w;
    comm.p = (Pointer)&s;

// 積分実行
// Nag 無限積分器で使うことができる無限の境界は 3 種類あります。
// Nag_LowerSemiInfinite, Nag_UpperSemiInfinite, Nag_Infinite
d01smc(f_callback, Nag_LowerSemiInfinite, x, epsabs, epsrel,
max_num_subint, &result, &abserr, &qp, &comm, &fail);

// エラーメッセージを出力することで、エラーを調査するには、以下の行の
コメントを解除します。
// if (fail.code != NE_NOERROR)
//     printf("%s\n", fail.message);

// 次の 3 つのエラー以外は、入力パラメータが不正であるか
```



```

// アロケーションエラーに当たります。 NE_INT_ARG_LT NE_BAD_PARAM
NE_ALLOC_FAIL
// メモリーリークを避けるため、積分ルーチンを呼ぶ前にメモリのアロケーションを解放する必要があります。
if (fail.code != NE_INT_ARG_LT && fail.code != NE_BAD_PARAM &&
fail.code != NE_ALLOC_FAIL)
{
    NAG_FREE(qp.sub_int_beg_pts);
    NAG_FREE(qp.sub_int_end_pts);
    NAG_FREE(qp.sub_int_result);
    NAG_FREE(qp.sub_int_error);
}

// フィット値の計算
y = y0 + result;

```

4. コンパイルボタンをクリックしてファイルをコンパイルします。

上記のコードでは、フィット関数 `_nlsfnag_integration_fitting` の本体の外側で、最初に被積分関数をコールバック関数 `f_callback` として定義しています。被積分関数を変数 `amp`、`center`、`width` でパラメータ化し、それらを `Nag_User` 構造体を使ってコールバック関数に渡します。フィット関数の内部で、NAG 積分器 `d01smc` を使って積分を実行します。

NAG 関数を呼び出すのは、自分でルーチンを書き出すよりも効率的になるはずですが、類似手法を使う事で、有限、無限、一次元、複数次元をフィット関数内で使用できるようになりました。NAG 直交 ページを読んで詳しく知りたいルーチンを選択してください。

パラメータの初期値または初期化コードを設定する

ユーザ定義のフィット関数なので、パラメータの初期値を指定する必要があります。非線形曲線フィットダイアログのパラメータタブで手動でセットすることができます。

関数をシミュレーションする

関数本体のコードを入力したら、コードビルダの「コンパイル」ボタンをクリックして、シンタックスにエラーがないかチェックすることができます。そして、「ダイアログに戻る」ボタンをクリックして、フィット関数オーガナイザダイアログボックスに戻ります。「保存」ボタンをクリックして、FDF ファイル(関数定義ファイル)を生成します。

FDF ファイルがあれば、「シミュレート」ボタンをクリックして、曲線のシミュレーションを行うことができ、これは初期値を求めるのに役立ちます。「simcurve」ダイアログで、適切なパラメータ値や X 範囲を入力すると、「プレビュー」パネルに曲線がどのように表示されるのかが表示されます。

曲線をフィットする

曲線フィットを行う前に、関数のシミュレーションを行うことは大変役立ちます。積分の実行には、ある程度の時間がかかりますが、誤りがあると「フィット」ボタンをクリックした後、Origin が反応しなくなる場合があります。そのため、フィット関数オーガナイザダイアログで、定義した関数を選択し、「シミュレート」ボタンをクリックします。すると、「simcurve」X ファンクションダイアログが開きます。推定される値を入力し、「適用」ボタンをクリックします。シミュレーションした曲線が、元のデータと近くなったら、フィットを行うことができます。

フィット関数をテストするには、

1. Origin に *Samples\Curve Fitting\Replicate Response Data.dat* をインポートします。
2. 次に、列 A のデータの対数スケールを使用します。そのために、列 A の $F(x) =$ 列ラベルに、列式 $Col(A) = \log(Col(A))$ を入力して **Enter** を押してデータを変換します。
3. 列 A と B を選択し、散布図を作成すると、形状はシングモイド型になっていることがわかります。
4. **NLFit** ダイアログを開くために、メニューから **解析:フィット:非線形曲線フィット** を選択します。
5. 上述のセクションで定義したフィット関数を選択し、**パラメータ** タブを開いて、すべてのパラメータを 1 で初期化し、**フィット** ボタンをクリックします。
6. 以下のような結果を得ることができます。

	値	標準誤差
y0	-0.00806	0.18319
A	3.16479	0.39624
xc	-0.19393	0.10108
w	1.77252	0.33878



LabTalk 関数を使った積分フィット

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 サンプルとステップ](#)
 - [3.1 フィッティングモデル](#)
 - [3.2 関数を定義する](#)
 - [3.3 曲線をフィットする](#)

サマリー

バージョン **Origin 8.6** から Origin は一元積分を行える新しい LabTalk の関数、**integral()** を取り入れました。この関数は次のような積分の値を算出します。

$$\int_{LowerLimit}^{UpperLimit} f(t, arg1, arg2, \dots), dt$$

integral() 関数のインターフェイスは次のように定義されています。

```
integral(integrandName, LowerLimit, UpperLimit [, arg1, arg2, ...])
```

ここでは *integrandName* はこの被積分関数の関数名になります。

$$f(t, \text{arg1}, \text{arg2}, \dots)$$

言い方を変えると、*integral()*関数は以下について行います。

- 他の関数を(第一アーギュメントとして)被積分関数に受け入れます。
- 定義された下限および上限に積分を行い、正数値を算出します。
- 必要に応じ、積分関数に後続の引数(Arg1, Arg2, ...)を追加することができます。

この機能を利用すると、*integral()*関数を使ってフィット関数を定義でき、正しいフィットパラメータを被積分関数に受け渡して積分曲線のフィットにあたります。

このチュートリアルでは以下のチュートリアル、NAG 関数を呼び出しフィット中に積分を行うを LabTalk 用に変更し、いかにシンプルに積分関数を使用してフィットできるかをお見せします。

必要な Origin のバージョン: Origin 8.6 以降



Origin 2018b から、積分を使って陰関数を定義することができます

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について解説します

- フィット関数ビルダーでフィット関数を作成する
- Labtalk 関数を使って積分定義を組み込んだフィット関数を定義する
- フィット関数の初期化コードをセットアップする

サンプルとステップ

フィッティングモデル

フィッティングモデルは次の式で表されます。

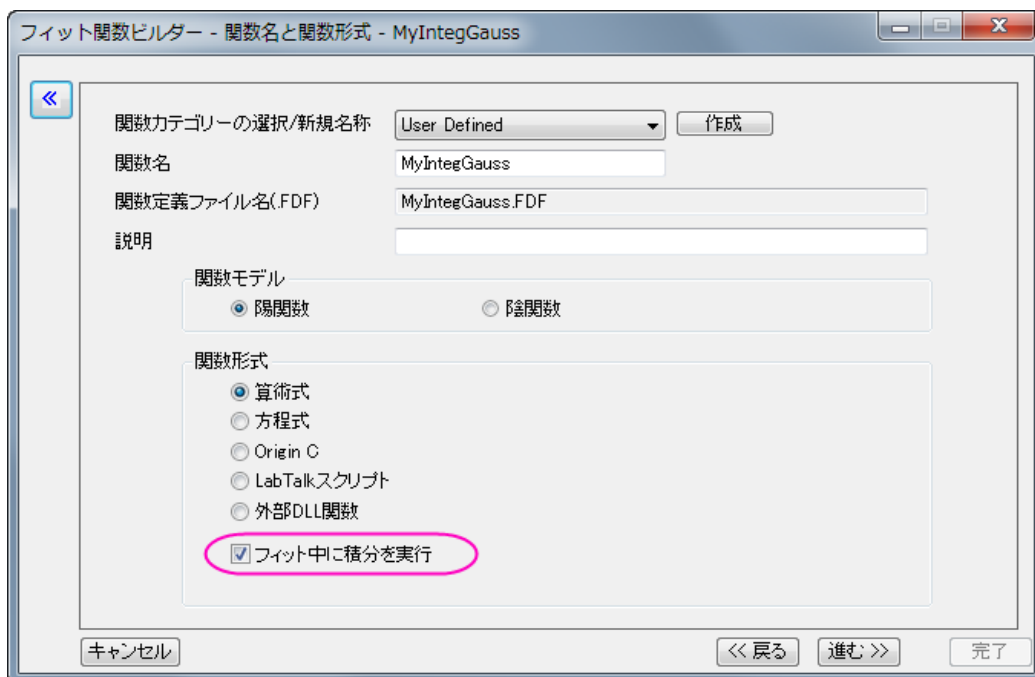
$$y = y_0 + \int_{-\infty}^x \frac{A}{w\sqrt{\frac{\pi}{2}}} e^{-2\frac{(t-x_c)^2}{w^2}} dt$$

フィット関数には 4 つのパラメータがあり、そのうち 3 つを被積分関数に受け渡し、独立変数を上限として積分を行います。よって、まず被積分関数を定義し、それをもとに *integral()* 関数を使用してフィット関数内で積分をします。

関数を定義する

1. **F8** を押して**フィット関数ビルダ**ダイアログを開きます。**新しい関数の作成**が選ばれていることを確認してから**進む**ボタンを押して次のページに進みます。

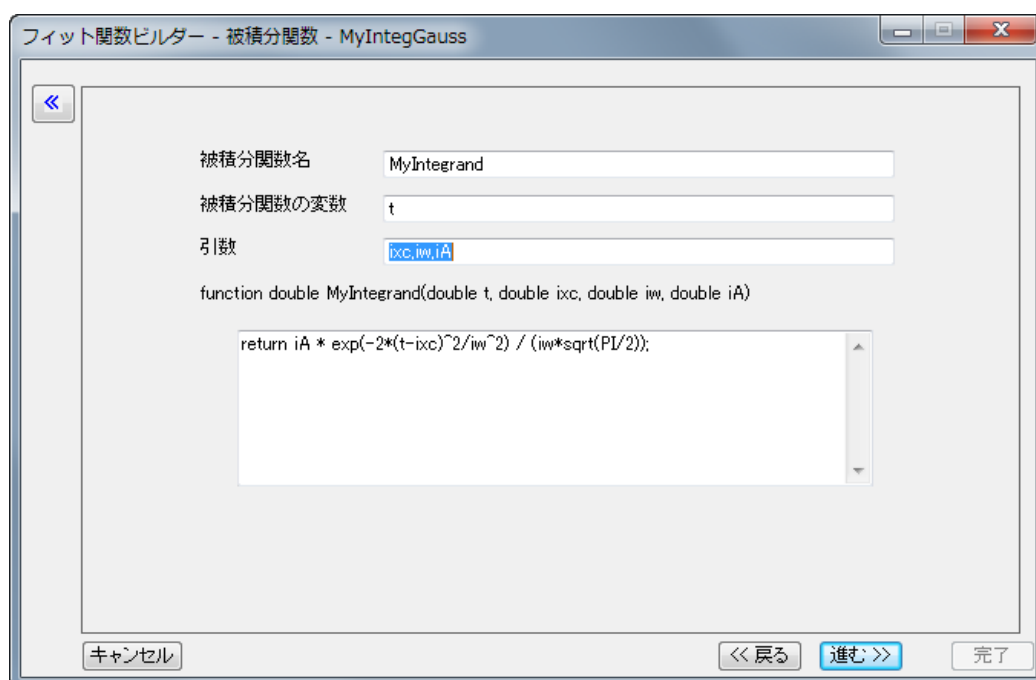
2. **関数名と関数形式**ページで関数名を **MyIntegGauss** と設定します。関数タイプはデフォルトの**算術式**のまま、**フィット中に積分を実行**にチェックをします。進むをクリックして、次のページに行きます。



3. **被積分関数**ページでは、被積分関数の表現を定義できます。現在、Origin は一元積分のみをサポートしているので、積分変数は1つのみです。この例では被積分関数の式は以下のようになります。

$$\frac{A}{w\sqrt{\frac{\pi}{2}}} e^{-2\frac{(t-x_c)^2}{w^2}}$$

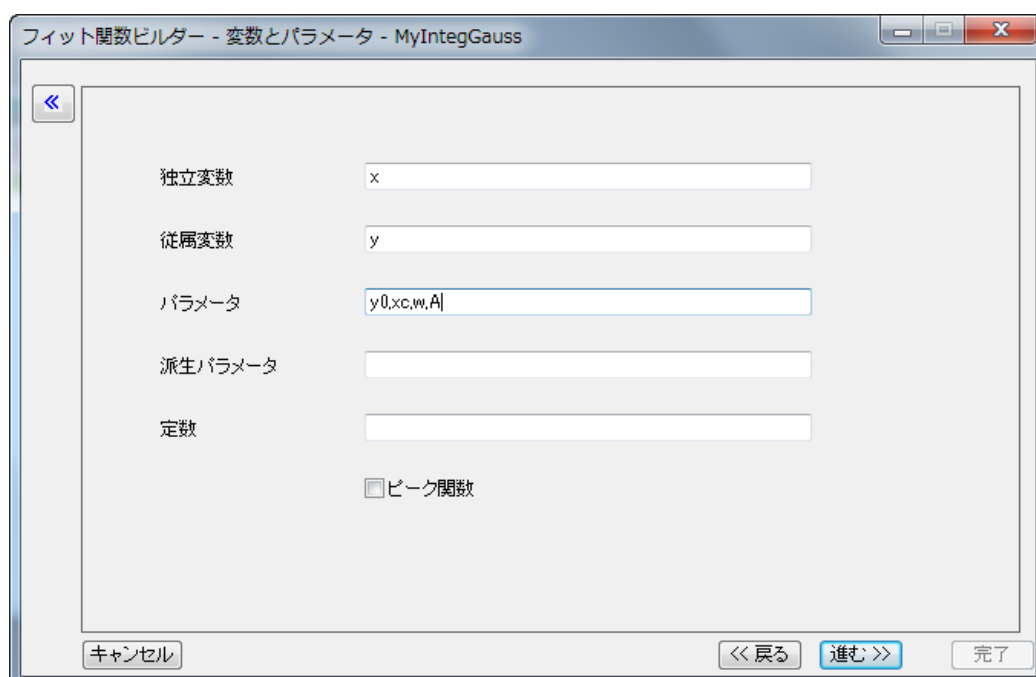
他の変数、 x_c 、 w 、 A は被積分関数のパラメータになります。T パラメータと区別するためにここでは **引数**として名前を付けます。よって、これらの引数は ixc 、 iw 、 iA となります。後程、フィットパラメータをこれらの引数に受け渡します。そのため、被積分関数は次のようになります。



これは LabTalk の関数であることに注意してください。積分値を入手するには関数内の定義に**リターン(RETURN)**記述が必要です。この例の中の被積分関数表現は次のようになります。

```
return iA * exp(-2*(t-ixc)^2/iw^2) / (iw*sqrt(PI/2));
```

4. 設定ができれば**進む**をクリックして**変数とパラメータ**ページへ進みます。そこで、下図のようにフィット関数の変数とパラメータを定義します。



5. 次の**関数**ページがフィット関数式の内容を定義するページです。フィット関数に積分を組み込むものをフィット関数ビルダーウィザードで設定すると、追加タブである**被積分関数**がこのページに表示されます。このタブでは、下限、上限、および積分の引数を含む、被積分変数とパラメータを被積分関数の要素で指定できます。この例では次のように変数の対応付けをします。

被積分関数の要素	被積分関数に受け渡す値
下限	-inf
上側限界	x
ixc	xc
iw	w
iA	A

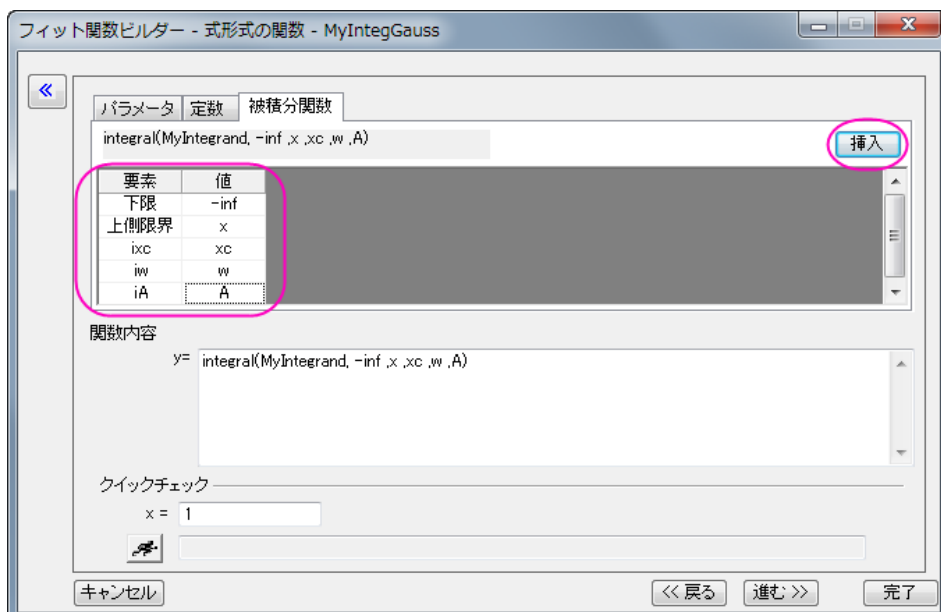
6. 上記表のように対応ができれば**挿入** ボタンを押します。すると、準備した `integral()` 関数が**関数式**ボックス内に以下のように挿入されます。

```
integral(MyIntegrand, -inf ,x ,xc ,w ,A)
```

7. この数式は「`MyIntegrand` という関数にマイナス無限数から `x` までを積分し、`xc`、`w`、`A` という 3 つのパラメータを被積分関数に送る」という意味です。
8. ここで定数パラメータ `y0` を数式に入れると、全体のフィット関数内容は次のようになります。

```
y0 + integral(MyIntegrand, -inf, x, xc ,w ,A);
```

9. そしてページは次のようになります。



10. パラメータタブをアクティブにし、適切な初期値を次のように設定します。

パラメータ		定数	被積分関数		
パラメータ	単位	意味	固定	初期値	有効桁数
y0		?	<input type="checkbox"/>	0	System
xc		?	<input type="checkbox"/>	0	System
w		?	<input type="checkbox"/>	2	System
A		?	<input type="checkbox"/>	3	System

完了ボタンを押してこのフィット関数を保存します。

曲線をフィットする

次のデータを Origin の新しいワークシートにコピー&ペーストします。

X	Y
-1.69897	0.13136
-1.22185	0.34384
-0.92082	0.6554
-0.82391	0.73699
-0.69897	1.00157
0	1.70785
0.30103	2.31437
0.69897	2.77326
1	2.79321

Y列を選択し、**Ctrl + Y** キーで **NLFit** ダイアログを開きます。先程定義した関数を選び、**フィット** ボタンをクリックしてフィットを行います。このフィットの結果は NAG 関数を直接利用したものと同じになります。

パラメータ		値	標準誤差
Y	y0	0	0
	xc	-0.2079	0.11445
	w	1.74486	0.20638
	A	3.12988	0.22705

自由度あたりのカイ二乗 = 0.0115022555412
 GDD(R²) = 0.9933383247056
 反復を実行しました = 4
 セッションの総反復回数 = 4
 フィットが収束しました: カイ二乗が変化しなくなりました。

チュートリアル:LabTalk 関数を使って 2 つの積分を含む関数でフィット

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 サンプルとステップ](#)
 - [3.1 フィッティングモデル](#)
 - [3.2 関数を定義する](#)
 - [3.3 曲線をフィットする](#)

サマリー

例えば、複数の積分を利用してフィット関数を作成するとき、

$$\int_{LL1}^{UL1} f(t, arg1, arg2, \dots) dt + \int_{LL2}^{UL2} g(x, arg3, arg4, \dots) dx$$

それぞれのパラメータの詳細については、LabTalk を利用した積分フィットをご覧ください。

Origin バージョン 8.6 では**フィット関数ビルダ**は 1 つの積分関数ののみをサポートしていました。このような複雑なコードを使わなくても、**フィット関数オーガナイザ**を使うことで、フィットをすることが来ます。

このチュートリアルでは、2 つの積分からなる関数をフィット関数オーガナイザを使ってフィットさせます。2 つ以上の積分を利用することも可能です。

必要な Origin のバージョン: Origin 8.6 以降



Origin 2018b から、積分を使って陰関数を定義することができます

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について解説します

- フィット関数ビルダーでフィット関数を作成する
- Labtalk 関数を使って積分定義を組み込んだフィット関数を定義する

サンプルとステップ

フィッティングモデル

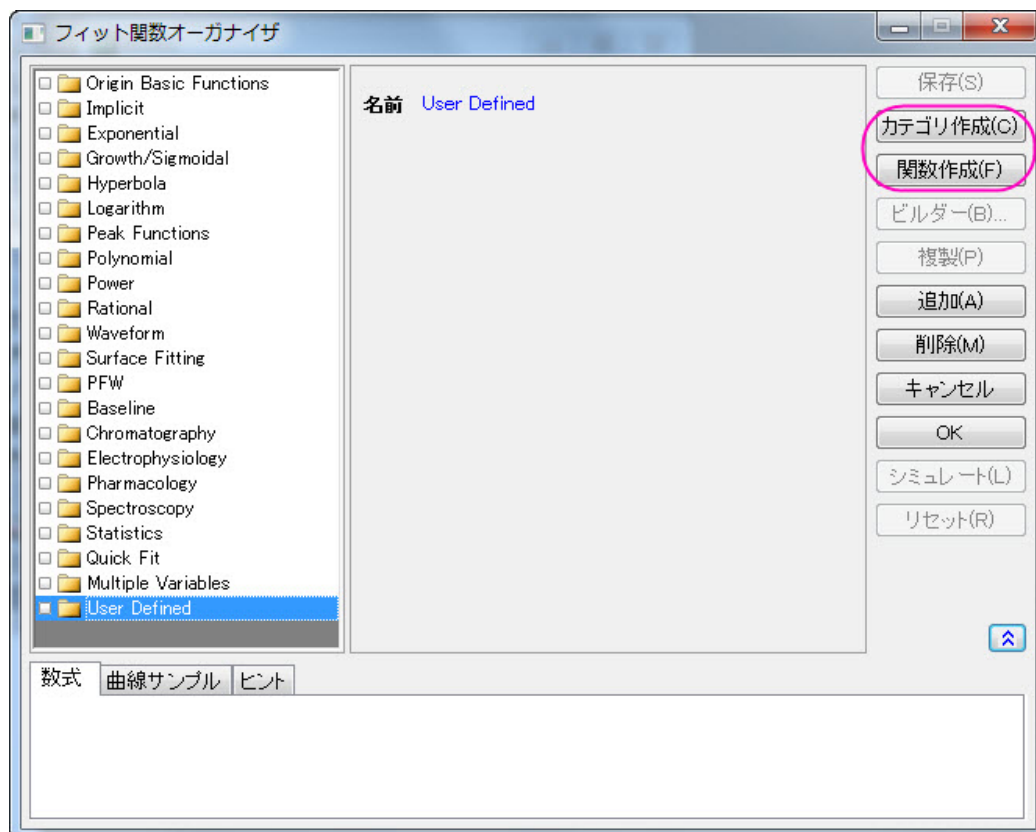
フィッティングモデルは次の式で表されます。

$$y = y_0 + \int_{-5}^x A t dt - \int_{-\infty}^x B t \exp(-t^2/w^2) dt$$

フィット関数には 4 つのパラメータがあり、そのうち 3 つを被積分関数に受け渡し、独立変数を上限として積分を行います。

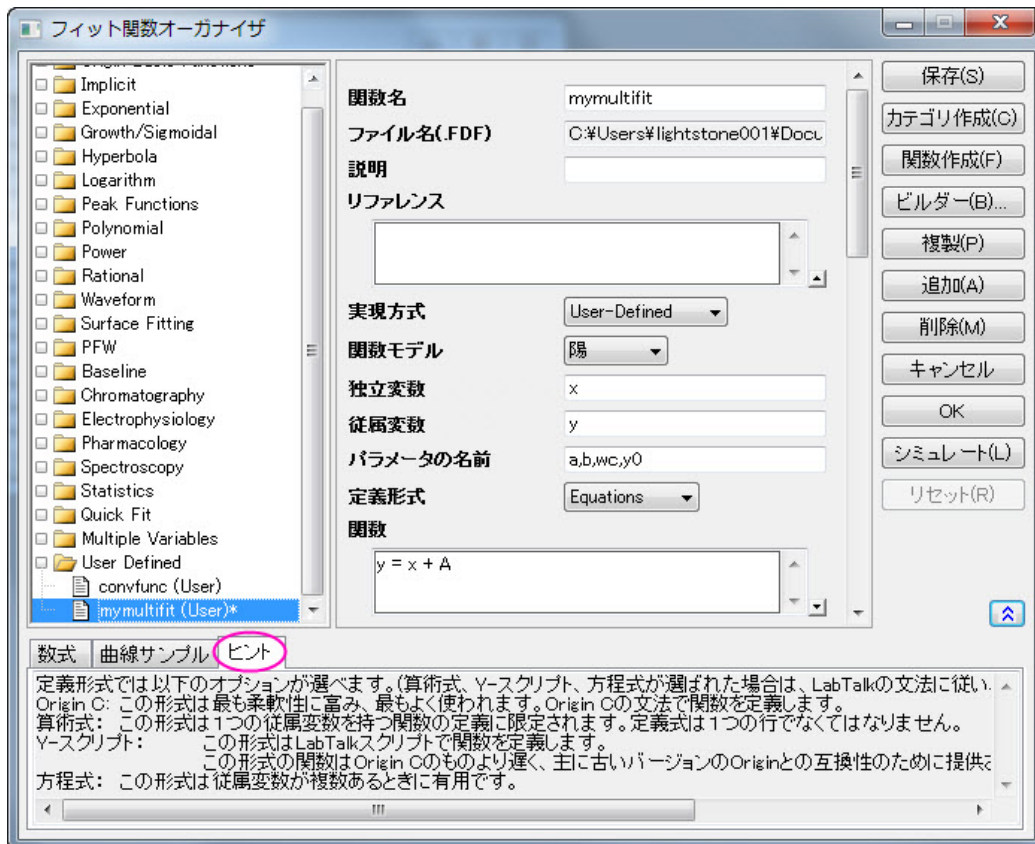
関数を定義します。

1. F9 を押してフィット関数ビルダダイアログを開きます。**関数作成**を押して新しい関数を追加します。**カテゴリ作成**ボタンで新しいカテゴリを作成できます。



2. **名前編集ボックス**で関数の名前を指定します。**独立変数**、**従属変数**そして**パラメータ名**をそれぞれの編集ボックスで定義します。

3. ドロップボックスから**実現方法**を選択します。ダイアログの下の**ヒント**タブで説明を確認できます。

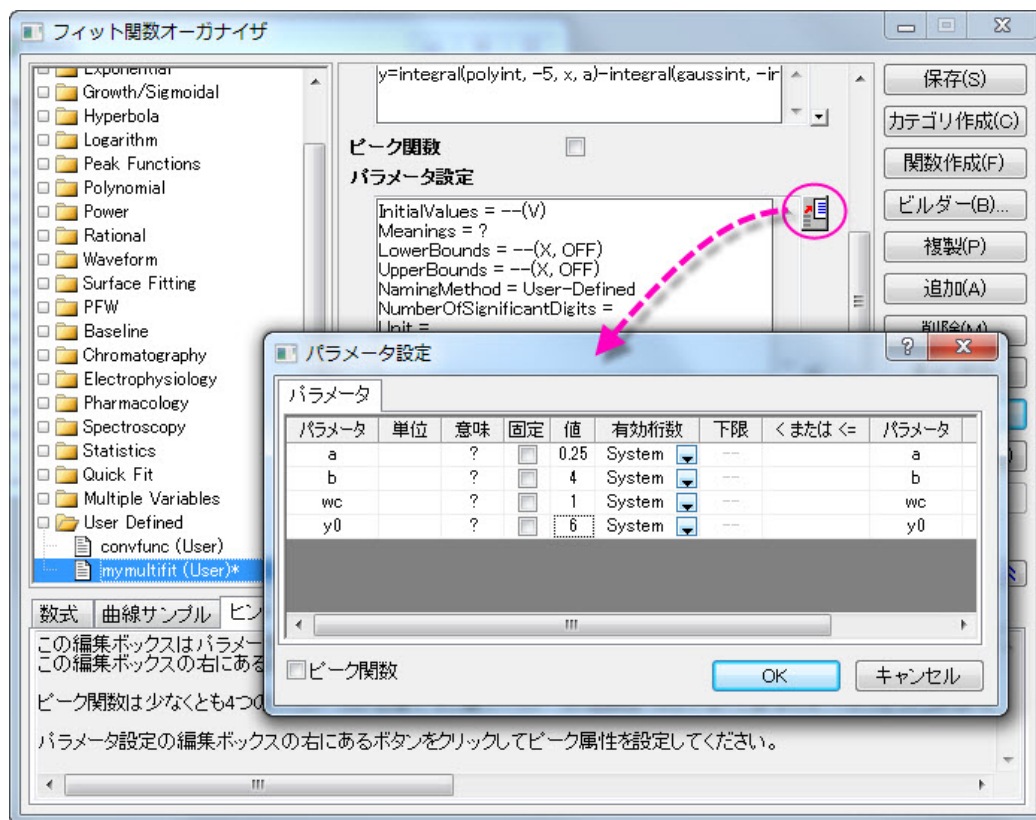


4. **関数編集ボックス**でフィット関数を定義します。積分関数は LabTalk の **integral** で作成します。

```
y=integral(polyint, -5, x, a)-integral(gaussint, -inf, x, b, wc)+y0
```

LabTalk 関数を使った積分フィットにもあるように、 x 、 a 、 b そして wc 被積分関数のパラメータになります。

5. **パラメータの設定ボックス**の右隣のボタンを押して、**パラメータ設定ダイアログ**を開きます。それぞれのパラメータの開始値と、下限、上限値を設定します。



6. LabTalk 関数の定義と初期化ボックスで2つの積分を定義します。今回は、以下のように設定します。

```
function double polyint(double t, double ia)
{
    return ia*t ;
}
function double gaussint(t, ib, iwc)
{
    return ib *t* exp(-(t)^2/iwc^2) ;
}
```


7. これで、2つの積分フィットが定義されました。その他の設定を行います。終了する前に、フィット関数を保存しましょう。

曲線をフィットする

次のデータを Origin の新しいワークシートにコピー&ペーストします。

X	Y
-3	2.47613

-2.6	2.24016
-2.2	2.01543
-1.8	1.83094
-1.5	1.85038
-1.1	2.17725
-0.9	2.44967
-0.7	2.61423
-0.5	3.02305
-0.3	3.23057
-0.1	3.37822
0.1	3.2827
0.3	3.18775
0.5	2.86194
0.7	2.69104
0.9	2.39315
1.4	2.04046
1.8	1.85287
2.2	1.85325
2.6	2.20569

Y列を選択し、CTRL + Yキーで **NLFit** ダイアログを開きます。定義した関数を選び、フィットボタン  をクリックしてフィットを行います。

パラメータ

	値	標準誤差	
Y	a	0.26191	0.03201
	b	3.5282	0.21956
	wc	1.07153	0.04832
	y0	4.57942	0.29938

自由度あたりのカイニ乗 = 0.00376913022891
 QD(R²) = 0.98854435477482
 反復を実行しました = 7
 セッションの総反復回数 = 7
 フィットが収束しました: 1E-9のカイニ乗許容条件を満たしました。

フィットしながら総和を求める

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 サンプルとステップ](#)
 - [3.1 関数を定義する](#)
 - [3.2 曲線をフィットする](#)

サマリー

NAG ライブラリを使って、積分込みのフィットを実行する方法を学習しましたが、今回は NAG 関数を使わずに行う方法を学習します。このチュートリアルでは、作成するフィット関数に総和を求める手順を含め、台形法則に基づいて積分を行う方法を学習します。

必要な Origin のバージョン:8.0 SR6

学習する項目

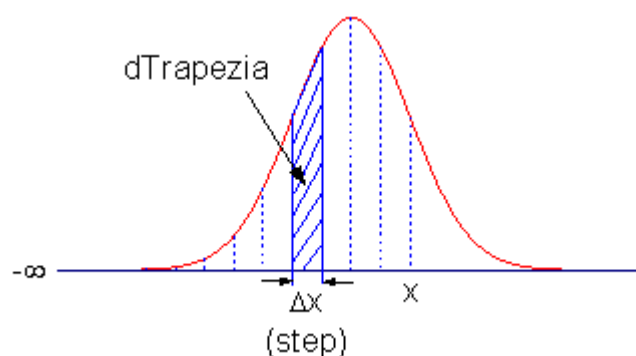
- フィット関数に総和を含める
- 台形法則に基づく積分

サンプルとステップ

NAG ライブラリを使った積分フィットと同じモデルを使ってフィットします。

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

違いは、フィット関数の中で積分を実行することです。台形法則を使うため、最初に曲線を小さい区間に分け、複数の台形から積分を近似します。結果の精度は使用する台形の数に依存します。これは片側無限の積分なので、増分(ステップ)をセットし、上側積分限界を x 、下側積分限界を負の無限大にして台形を作成し、これらの台形の面積の累計を計算します。面積の増分が十分に小さくなったら、総和の計算を中止します。総和を行う前に、関数が収束していることを保証するか、収束チェックをコードに含める必要があります。



関数を定義する

ツール:フィット関数オーガナイザと選択するか **F9** キーを押して **フィット関数オーガナイザ**を開き、関数を次のように定義します。

関数名: summation

実現方式: UserDefined

独立変数: x

従属変数: y

パラメータの名前: y0, A, xc, w

定義形式: [Origin C](#)

関数:

関数ボックスの横にあるボタン(アイコン)をクリックして、コードビルダを開きます。フィット関数の定義、コンパイル、保存を次のように行います。

```
#pragma warning(error :15618)
#include <origin.h>

// 被積分関数の為のサブルーチン
double f(double x, double A, double xc, double w)
{
    return A * exp(-2*(x-xc)*(x-xc)/w/w) / w / sqrt(PI/2);
}

//-----
//
void _nlsfsummation(
// フィットパラメータ:
double y0, double A, double xc, double w,
// 独立変数:
double x,
// 従属変数:
double& y)
{
    // 編集可能部分の開始
    // 積分中止の許容値をセット
    double dPrecision = 1e-12;
    // 初期化
    double dIntegral = 0.0;
    double dTrapezia = 0.0;
    // ステップまたは精度
    double dStep = 0.01;
    //台形法則による積分実行
    // 関数が収束したことを保証
    do
```

```

{
    // 台形の面積
    dTrapezia = 0.5 * ( f(x, A, xc, w) + f((x-dStep), A, xc, w) ) *
dStep;
    // 面積の累計
    dIntegral += dTrapezia;
    x -= dStep;
}while( (dTrapezia/dIntegral) > dPrecision );
// y 値のセット
y = y0 + dIntegral;
// 編集部分の終了
}

```

曲線をフィットする

結果を比較するために同じデータを使うこともできます。

1. *Samples\Curve Fitting\Replicate Response Data.dat* をインポートします。
2. 最初の列を選択し、コンテキストメニューから列値の設定を選択します。
3. 列値の設定ダイアログに $Col(A) = \log(Col(A))$ とセットします。これはシグモイド曲線を作成します。
4. 列 A と B を選択し、散布図を作成します。
5. そして、**Ctrl + Y** を押し、**NLFit** ダイアログを開きます。先ほど定義したフィット関数を選択し、**パラメータ** タブに移動して、すべてのパラメータを 1 で初期化し、フィットします。以下のような結果になります。

	値	標準誤差
y0	-0.00806	0.18319
A	3.16479	0.39624
xc	-0.19393	0.10108
w	1.7725	0.33878



複素関数でのフィッティング

サマリー

複素関数でフィットするとき、複素関数を 2 つの関数に簡単に分けることができます。1 つは実数部に対応し、もう 1 つは虚数部に対応するように分けます。これら 2 つの関数を使って、**フィット関数オーガナイザ** で 2 つの従属変数を持つ複素関数を定義することができ、それを **NLFit** ダイアログで使うことができます。以下に、複素関数でフィットする方法を示します。複数の従属変数または独立変数を持つフィットについての詳細は、複数の独立変数でフィットするをご覧ください。

必要な Origin のバージョン: 8.0 SR6

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

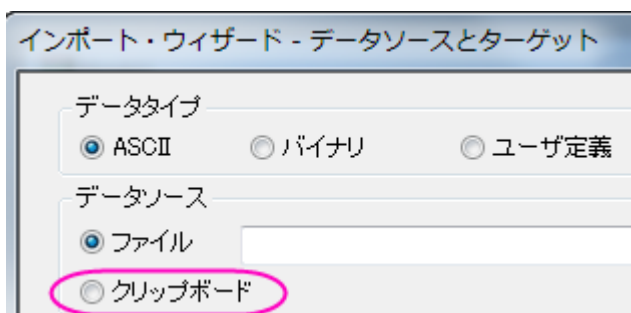
- 2つの従属変数と1つの独立変数を持つユーザ定義の複素関数を作成する
- NLFit でその関数でフィットする

ステップ

1. 下記のフォーム全体(ヘッダ行を含む)を選択し、右クリックしてコピーを選択し、クリップボードにデータをコピーします。

Omega	Y1	Y2
0	3	0
0.01	2.88462	-0.28846
0.02	2.58621	-0.51724
0.03	2.20588	-0.66176
0.04	1.82927	-0.73171
0.05	1.5	-0.75
0.06	1.22951	-0.7377
0.07	1.01351	-0.70946
0.08	0.8427	-0.67416
0.09	0.70755	-0.63679
0.1	0.6	-0.6
0.11	0.5137	-0.56507

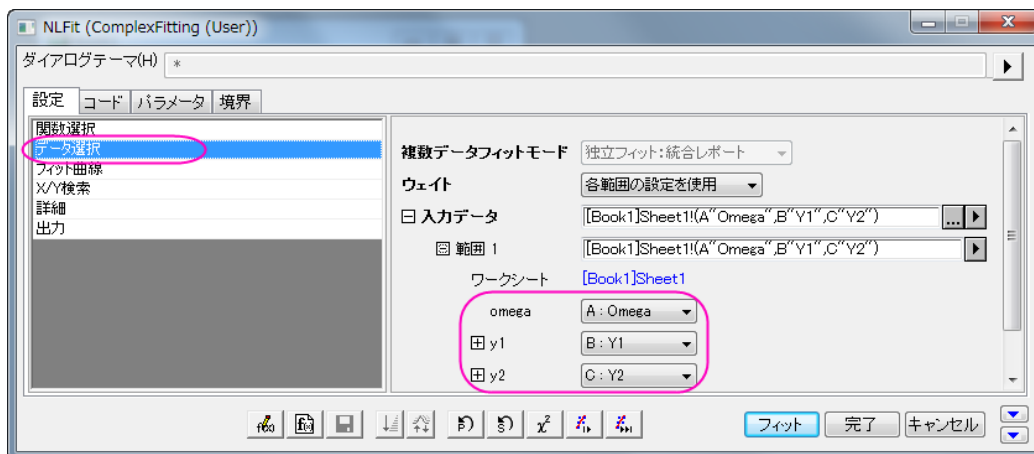
2. メニューから**インポート:インポートウィザード**を選択し、「インポートウィザード」ダイアログを開きます。そして、**データソースグループからクリップボード**を選び、**完了**ボタンをクリックして、データをインポートします。



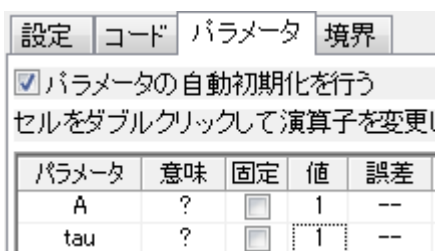
3. Select **Tools:フィット関数オーガナイザ**」を選択(または **F9** を押す)し、**フィット関数オーガナイザ**を開き、**NewCategory** カテゴリー(カテゴリーが無ければ作成)に **ComplexFitting** という名前の新しい関数を次のように定義します。

関数名:	ComplexFitting
実現方式:	ユーザ定義
独立変数:	omega
従属変数:	y1,y2
パラメータの名前:	A,tau
定義形式:	Origin C
関数:	<pre>complex cc = A/(1+1i*omega*tau); y1 = cc.m_re; y2 = cc.m_im;</pre>

- Note:複素数を作成するために虚数の単位"i"を使うには、上記の関数の行のように、Origin Cで"1i"と記述する必要があります。そして、**complex** は、複素数のデータタイプを取り扱うクラスです。これには、実数部と虚数部の両方が含まれます。
- ユーザ定義関数についての詳細は、Origin Cを使ったユーザ定義関数をご覧ください。
- ワークシートのすべての列を選択し、**解析:フィット:非線形曲線フィット**と操作してNLFitダイアログを開きます。**設定:関数選択**ページで、**<新規...>** カテゴリにある**ComplexFitting**関数を選択します。次のように、**データ選択**ページで入力データセットをセットします。



- パラメータ**タブを選択し、初期値を次のようにセットします。



8. フィットボタンをクリックし、フィットレポートを生成します。レポートワークシートから次のように結果を見ることができます。

パラメータ			
		値	標準誤差
Y1,Y2	A	2.36712	0.15413
	tau	15.84746	1.94844

統計		Y1,Y2
ポイント数		24
自由度		22
自由度あたりカイ二乗		0.12339
残差平方和		2.71452
補正R二乗		0.92387
フィット状況		成功(100)

統計の表より、良いフィットができたことが分かります。



コンボリューションしながらフィットする

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 サンプルとステップ](#)
 - [3.1 背景](#)
 - [3.2 関数を定義する](#)
 - [3.3 曲線をフィットする](#)

サマリー

指数データに曲線フィットを実行するとき、データに含まれる機器の応答を考慮する必要があるかもしれません。これを行う1つの方法は、データにデコンボリューションを実行し、機器の応答データを除去し、2番目のステップとして曲線フィットを実行します。しかし、結果がデータ内に存在するノイズの影響を受けやすいので、デコンボリューションは常に信頼できるとは限りません。より信頼性の高い方法は、フィット実行中に機器の応答データを持つデータに対して、フィット関数のコンボリューションを実行することです。このチュートリアルでは、フィット中にコンボリューションを実行する方法を示します。



もし、使うデータが Gauss と指数関数のコンボリューションの場合、組み込み関数である **Peak Functions** カテゴリ内にある GaussMod を使って直接データをフィットできます。

必要な Origin のバージョン: Origin 2016 SR0

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について解説します:

- 反復実行中にフィット情報にアクセスする
- フィット中にコンボリューションを実行する

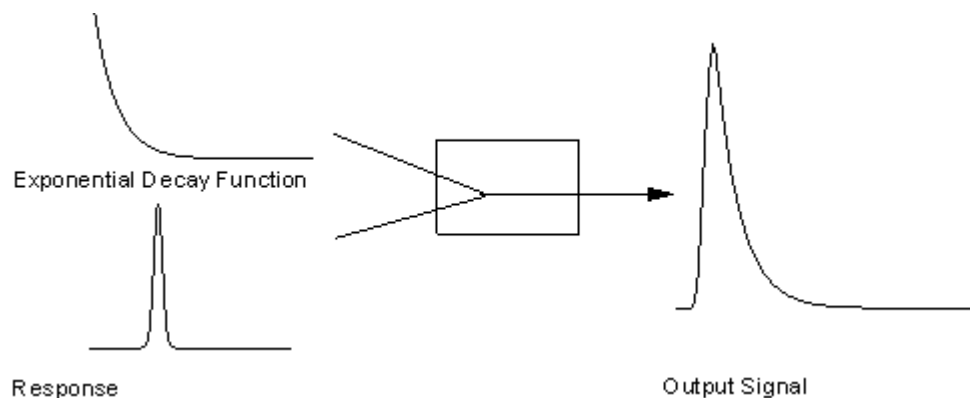
サンプルとステップ

背景

\Samples\Curve Fitting\FitConv.dat をインポートしてこのサンプルを開始しましょう。

A(X)	B(Y)	C(Y)
Sampling	Signal	Impulse
0	-0.19775	0
0.1	-0.32893	0
0.2	0.10055	0
0.3	0.09394	0
0.4	-0.1292	0
0.5	0.06346	1.48672E-6
0.6	0.19453	1.3383E-4

ソースデータには、サンプルポイント、出力信号、インパルス応答が含まれています。この実験は、出力信号がガウス応答を持つ指数減少関数のコンボリューションであると見なしています。



これで、出力信号と応答データを得たので、信号を次のモデルでフィットして、指数減少関数を得ることができます。

$$y = y_0 + \int_{-\infty}^{+\infty} Ae^{-tx} \otimes Response, dx$$

関数を定義する

明らかに、列 1 と列 2 は、それぞれ関数の x と y です。列 3 はインパルス応答でしょうか？ フィット関数でこの列にアクセスし、サンプリングポイントから理論指数曲線を計算します。そして、FFT を使ってコンボリューションを実行します。

F9 を押し、**フィット関数オーガナイザ**を開き、以下のように関数を定義します。

関数名: FitConv

関数形式: ユーザ定義

独立変数: x

従属変数: y

パラメータの名前: y0, A, t

定義形式: [Origin C](#)

関数:

関数ボックスの隣にあるボタン(アイコン)をクリックし、コードビルダに関数を記述します。

```
#pragma warning(error : 15618)
#include <origin.h>
// ヘッダーファイルは必須です。
#include <ONLSF.H>
#include <fft_utils.h>
//
//
void _nlsfTestConv(
// フィットパラメータ :
double y0, double A, double t,
// 独立変数 :
double x,
// 従属変数 :
double& y)
{
    // 編集部分の始まり
    NLFitContext *pCtxt = Project.GetNLFitContext();
    Worksheet wks;
    DataRange dr;
    int c1, c2;
    dr = pCtxt->GetSourceDataRange(); //元データ範囲を取得
    dr.GetRange(wks, c1, c2); //元データワークシートを取得
    if ( pCtxt )
    {
        // 個々の反復での出力信号のベクトル
        static vector vSignal;
        // パラメータが更新されると、コンボリユーションの結果も再計算される
        BOOL bIsNewParamValues = pCtxt->IsNewParamValues();
        if ( bIsNewParamValues )
        {
            // ワークシートからサンプリングと応答データを読み取る
            Dataset dsSampling(wks, 0);
            Dataset dsResponse(wks, 2);
            int iSize = dsSampling.GetSize();

            vector vResponse, vSample;

            vResponse = dsResponse;
            vSample = dsSampling;

            vSignal.SetSize(iSize);
        }
    }
}
```

```

vResponse.SetSize(iSize);
vSample.SetSize(iSize);

// 指数減少曲線を算出
vSignal = A * exp( -t*vSample );
// コンボリューションの実行
int iRet = fft_fft_convolution(iSize, vSignal, vResponse);
// サンプル間隔を掛けることでコンボリューションを修正
vSignal = (vSample[1]-vSample[0])*vSignal;

}

NLSFCURRINFO      stCurrInfo;
pCtxt->GetFitCurrInfo(&stCurrInfo);
// 反復のためにデータインデックスを入手
int nCurrentIndex = stCurrInfo.nCurrDataIndex;
// 評価した y 値を入手
y = vSignal[nCurrentIndex] + y0;
// ここでは x を利用していないため、関数をコンパイルするために使用
x;
}
// 編集可能エリア終了
}

```

特定の x に対して、関数は対応する y 値を返します。しかし、コンボリューションが実行されると、特定のデータポイントだけでなく、曲線全体に対して操作を実行する必要があります。Origin 8 SR2 から、フィット内での主要情報を取得するために、NLFitContext クラスを導入しました。各反復計算で、NLFitContext を使って、フィットパラメータを監視しています。それらが更新されると、fft_fft_convolution メソッドにより、FFT を使ってコンボリューションを計算します。結果はベクターデータ vSignal に保存されます。各 x に対して、NLSFCURRINFO 内の現在のデータインデックスを使って、vSignal から評価した y を取得できます。

曲線をフィットする

フィット関数の本体で、アクティブワークシートから直接応答データを読み込みます。よって、ワークシートからフィットを実行します。

1. 列 B を選択し、**Ctrl + Y** を押し、**非線形フィット** ダイアログを開きます。
2. **フィット曲線** ページの **X データ型** では **入力 X に同じ** を選択します。
3. 関数選択ページに戻り、定義した **FitConv** 関数を選びます。
4. パラメータを $y_0=0$, $A=10$, $t=1$ のように初期化します。
5. **フィット** ボタンをクリックし、結果を生成します。

このチュートリアルで説明した関数と同じようなフィット関数を使用する場合、NLFit を実行する際は、NLFit ダイアログの設定タブで、**フィット曲線の X データ型** に **入力データと同じ** を設定するようにしてください。



ユーザ定義関数で組み込み関数を引用する

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ステップ](#)
 - [3.1 データ](#)
 - [3.2 関数を定義する](#)

サマリー

このチュートリアルでは、ユーザ定義のフィット関数を作成する時に組み込み関数を引用する方法を示します。
必要な Origin のバージョン:8.0 SR6

学習する項目

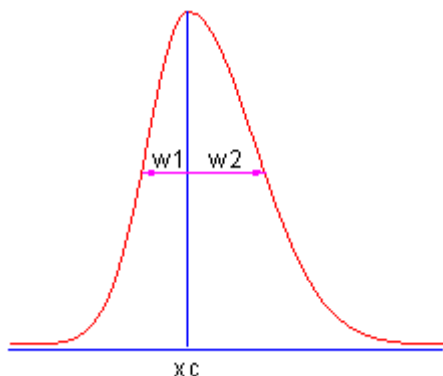
このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- 区間のフィット関数を定義する
- 新しい関数で組み込み関数にアクセスする
- パラメータの自動初期化

ステップ

データ

新しいワークブックに `\Samples\Curve Fitting\Asymmetric Gaussian.dat` のファイルをインポートするところから始めます。
列 B を選択してグラフを作成します。データ内のピークはわずかに右に傾いています。このような曲線をフィットするにはどうしたら良いでしょうか?1つのアイデアとして、グラフを2つの区間に分けて下図のように2つのガウス関数から成り立っていると考える事ができます。これらの2つのガウス曲線は、基線とピークを中心を共有し、ピークの幅と振幅が異なります。



関数を定義する

F9 を押し、フィット関数オーガナイザを開き、以下のように関数を定義します。

関数名: AsymmetricGauss

実現方式: ユーザ定義

独立変数: x

従属変数: y

パラメータの名前: y0, xc, w1, w2, A1, A2

定義形式: [Origin C](#)

関数: $y = x < xc ? \text{nlf_Gauss}(x, y0, xc, w1, A1) : \text{nlf_Gauss}(x, y0, xc, w2, A2);$

Note:

Origin 8.1 より前のバージョンでは、関数は次のように定義します。

```
y = x < xc ? nlfxGauss(x, y0, xc, w1, A1) : nlfxGauss(x, y0, xc, w2, A2);
x; y0; xc; w1; w2; A1; A2;
```

最後にパラメータを一覧にすると、関数でこれらのパラメータを使っているにもかかわらず、関数内でパラメータが使われていないというエラーを避けることができます。この手順は関数を正しくコンパイルするのに必要です。

組み込み関数を利用するために **nlf_FuncName** を呼び出す場合のシンタックスは

```
nlf_FuncName(独立変数、パラメータリスト ...)
```

FuncName がフィット関数の名前です。古い表記法ですが、**nlfxFuncName** もサポートしています。

組み込み関数のパラメータリストは関数定義ファイル(FDF ファイル)で設定された順番に従います。(FDF ファイルはメモ帳で開く事ができます。ファイルは \\Origin EXE Folder\FitFunc\ に保存されています。) Origin 内で使用する関数名は DLL インターフェイス名のもので、本来の名前は FDF ファイルの「General Information」セクションに表示されます。*Function Source* 項目を見て、値が **fgroup.FuncName** で、この *FuncName* を使用します。通常、この関数名は NLFit ダイアログに表示される関数名で一貫性があります。Voigt のようにいくつかの関数名は異なります。

この関数のパラメータ初期化には、ガウス関数の初期化コードをコピーして、いくつか修正を加えるだけで行えます。

```
xc = peak_pos(x_y_curve, &w1, &y0, &A1);
w2 = w1;
A2 = A1;
```

最終的な関数は次のようになります。

関数名	AsymmetricGauss
ファイル名(.FDF)	C:\Users\lightstone001\Doc
説明	
リファレンス	
実現方式	User-Defined
独立変数	x
従属変数	y
パラメータの名前	y0,xc,w1,w2,A1,A2
定義形式	Origin C
全ての数値を倍精度として扱う	<input checked="" type="checkbox"/>
理論微分式	<input type="checkbox"/>
関数	<code>y = x<xc? nlf_Gauss(x, y0, xc, w1, A1) : nlf_Gauss(x, .</code>
ピーク関数	<input type="checkbox"/>
パラメータ設定	<pre>InitialValues = --(V) Meanings = ? LowerBounds = --(X, OFF) UpperBounds = --(X, OFF) NamingMethod = User-Defined NumberOfSignificantDigits = Unit =</pre>
自動初期化を行う	<input checked="" type="checkbox"/>
OriginCを使う	<input checked="" type="checkbox"/>
パラメータ初期化	<code>xc = peak_pos(x_y_curve, &w1, &y0, &A1); w2 = w1;</code>

関数の作成がうまくいったら、関数を保存して曲線をフィットします。結果は次のようになります。

		値	標準誤差
Amplitude 1	y0	1.80002	4.79492E-5
	xc	4.50001	3.44845E-5
	w1	1.80003	4.49861E-5
	w2	2.99998	4.87666E-5
	A1	30	0.00103
	A2	49.99962	0.00111



非定数のバックグラウンドを持つフィット関数

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 サンプルとステップ](#)
 - [3.1 データの準備](#)
 - [3.2 関数を定義する](#)
 - [3.3 自動パラメータ初期化](#)
 - [3.4 曲線をフィットする](#)

サマリー

Origin の組み込み関数の多くは、次のように定義されます。

$$y = y_0 + \dots$$

ここで y_0 は、定数のバックグラウンドとして扱うことができます。では、非定数のバックグラウンドを持つ曲線は、どのようにフィットしたら良いのでしょうか? 1つの方法として、OriginPro で提供しているピークアナライザを使うことができます。ピークアナライザには、指数または多項式のバックグラウンドを含む基線を減算する方法がいくつかあります。このチュートリアルでは、ピークアナライザを使わずに、このような曲線をフィットする方法を示します。

必要な Origin のバージョン: 8.0 SR6

学習する項目

- ワークシートクエリの復習
- `nlfxFuncName` メソッドで組み込み関数を引用する
- パラメータの自動初期化

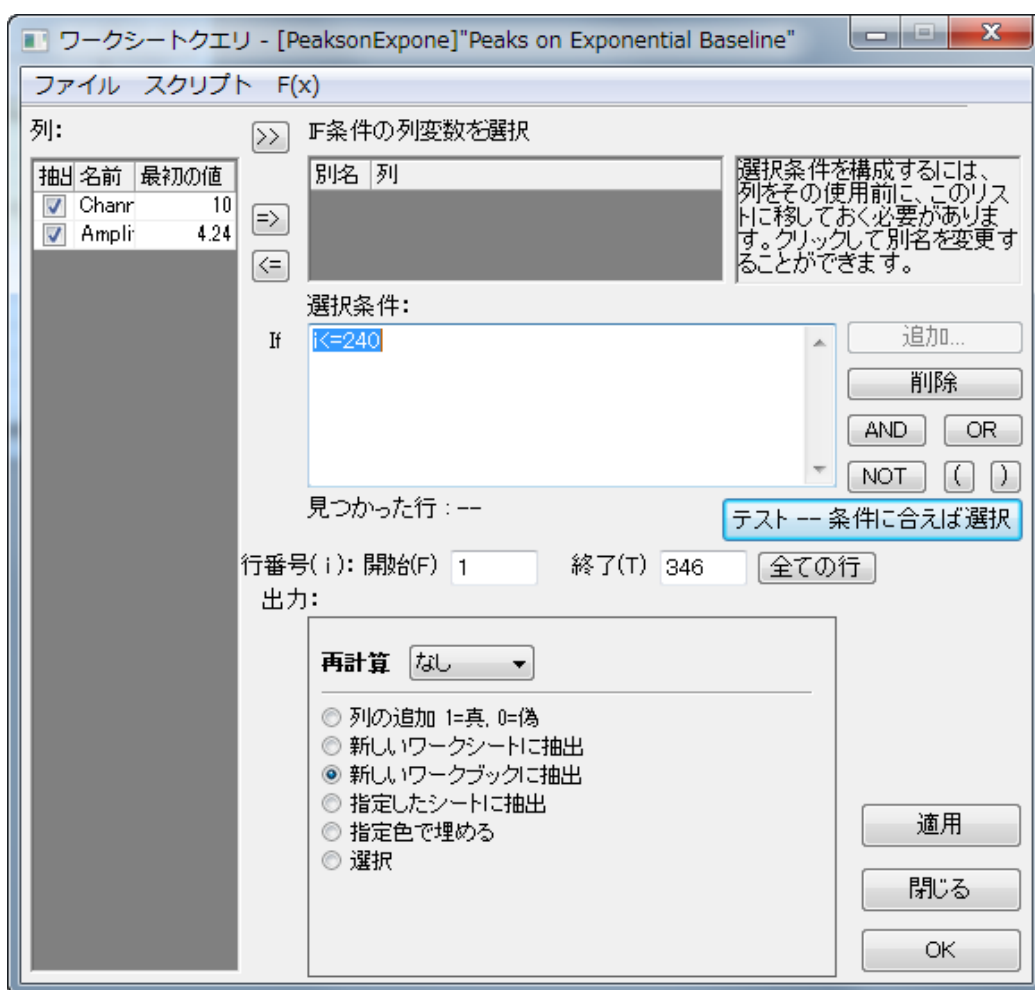
サンプルとステップ

データを準備する

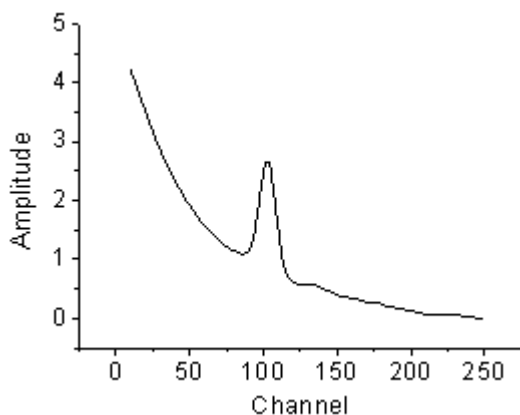
`\Samples\Spectroscopy\Peaks on Exponential Baseline.dat` をインポートして、このチュートリアルを開始します。ワークシートのスパークラインから、曲線に 2 つのピークがあることが分かります。問題を単純化するため、この例の 1 つのピークをフィットします。

	A(X)	B(Y)
ロングネーム	Channel	Amplitude
単位		
コメント		
スパークライン		
1	10	4.24
2	11	4.16
3	12	4.09
4	13	4.02
5	14	3.95
6	15	3.89

メニューからワークシート:ワークシートクエリと操作して、ワークシートクエリダイアログを開きます。行 1 から行 240 のデータを抽出します。

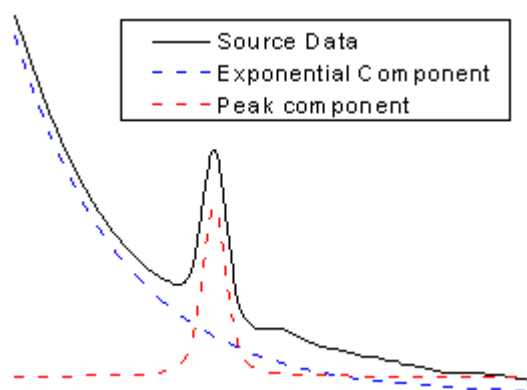


フィットする曲線は次のようになります。



関数を定義する

下の図から分かるように、元の曲線は指数関数形崩壊（バックグラウンドに相当）と Voigt ピークの組み合わせである事が分かります。



関数全部を記述して関数を定義しなければならないでしょうか？例えば：

$$y = y_0 + A_1 e^{-x/t_1} + A_2 \frac{2w_L \ln 2}{\pi^{3/2} w_G^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{\left(\sqrt{\ln 2} \frac{w_L}{w_G}\right)^2 + \left(\sqrt{4 \ln 2} \frac{x-x_c}{w_G} - t\right)^2} dt$$

これは複雑な数式で、無限区間の積分も含まれています。数式を直接記述するのは大変です。Origin には次の 2 つの組み込み関数があります。

ExpDec1

$$y = y_0 + A e^{-x/t}$$

Voigt

$$y = y_0 + A \frac{2w_L \ln 2}{\pi^{3/2} w_G^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{\left(\sqrt{\ln 2} \frac{w_L}{w_G}\right)^2 + \left(\sqrt{4 \ln 2} \frac{x-x_c}{w_G} - t\right)^2} dt$$

nlfxFuncName メソッドを使って、これら 2 つの関数を引用し、新しい関数を簡単に作成することができます。**F9** を押し、**フィット関数オーガナイザ**を開き、以下のように関数を定義します。

関数名: ExpVoigt

実現方式: ユーザ定義

独立変数: x

従属変数: y

パラメータの名前: y0, A1, t1, xc, A2, wG, wL

定義形式: [Origin C](#)

関数: $y = \text{nlf_ExpDec1}(x, y0, A1, t1) + \text{nlf_Voigt}(x, y0, xc, A2, wG, wL) - y0;$

Note:

1. 組み込み関数名のいくつかは、実際の DLL 関数名と一致しません。Voigt5.FDF で定義している Voigt 関数のように、メモ帳で FDF ファイルを開く場合、[GENERAL INFORMATION]セクションの中に次の行があります。

Function Source=fgroup.Voigt5

"fgroup"の後の名前は、**nlfFuncName** に入れる実際の名前です。

Origin 8.1 SR2 以前のバージョンでは、関数のボディは次に定義されるような旧式の nlfFuncName を使ってください。

```
y = nlfxExpDec1(x, y0, A1, t1) + nlfxVoigt(x, y0, xc, A2, wG, wL)
- y0;
x; xc; A1; t1; A2; wG; wL;
```

最後にパラメータを一覧にするのは、関数でこれらのパラメータを使っているにもかかわらず、関数内でパラメータが使われていないというエラーを避けるためです。これを入れないと、関数のコンパイルがうまくいきません。

パラメータ設定の右にあるボタン  をクリックし、これらのパラメータの初期値を入力します。

y0: 0

A1: 5

t1: 50

xc: 100

A2: 50

wG: 10


wL: 10

ですので、最終的な定義部分は、次のようになります。

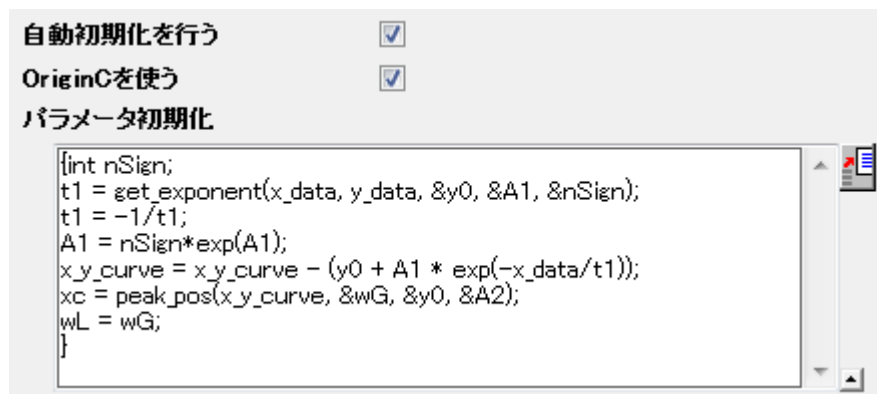
関数名	ExpVoigt
ファイル名(.FDF)	C:\Users\lightstone001\Documents\Origir
説明	
リファレンス	
実現方式	User-Defined
関数モデル	陽
Independent Variables	x
Dependent Variables	y
パラメータの名前	y0,A1,t1,xc,A2,wG,wL
定義形式	Origin C
全ての数値を倍精度として扱う	<input checked="" type="checkbox"/>
理論微分式	<input type="checkbox"/>
関数	$y = \text{nlf_ExpDec1}(x, y0, A1, t1) + \text{nlf_Voigt}(x, y0, xc, A2, wG, wL) - y1$
ピーク関数	<input type="checkbox"/>
パラメータ設定	<pre>InitialValues = 0(v),5(v),50(v),100(v),50(v),10(v),10(v) Meanings = ?,?,?,?,?,? LowerBounds = --(I, Off),--(I, Off),--(I, Off),--(I, Off),--(I, Off),--(UpperBounds = --(I, Off),--(I, Off),--(I, Off),--(I, Off),--(I, Off),--(I NamingMethod = User-Defined NumberOfSignificantDigits = 0,0,0,0,0,0,0 Unit = ,,,,, Format = --,--,--,--,--,--,-- CustomDisplay = --,--,--,--,--,--,--</pre>

自動パラメータ初期化

上記のセクションで、パラメータの初期値を固定にセットしました。有かなフィット結果を知っていれば、このように初期値をセットすることができます。しかし、データが変わった場合はどうでしょうか?Origin は、初期値を推定する Origin C インターフェースを提供しています。パラメータ初期化コードを使うには、**パラメータの自動初期化を行うと Origin C を使用する**チェックボ

ックスにチェックを付け、アイコンをクリックしてコードビルダでコードを編集します。

(初期値をよく分かっていたり、コードを記述したくない場合、このセクションを読み飛ばしても構いません。)



曲線は2つのコンポーネントで構成され、これら2つの部分を分けることで、パラメータ値を推測できます。初期化コードには次を含みます。

1. get_exponent 関数を使って、曲線をフィットし、指数成分に対するパラメータ値を取得します。
2. 元のデータからバックグラウンド(指数成分)を除去します。
3. peak_pos 関数を使って、ガウスピークによってピークを近づけ、ピークコンポーネントに対する初期値をセットします。

コードビルダ内の初期化コードは次のようになります。

```
void _nlsfParamExpVoigt (
// フィットパラメータ:
double& y0, double& A1, double& t1, double& xc, double& A2, double& wG, double&
wL,
// 独立データセット
vector& x_data,
// 従属データセット
vector& y_data,
// 曲線
Curve x_y_curve,
// 補助的なエラーコード
int& nErr)
{
    // 編集可能部分の開始
    int nSign;
    // y = y0+A*exp(R*x) に対するパラメータの値 y0, ln(A), R を評価
    t1 = get_exponent(x_data, y_data, &y0, &A1, &nSign);
    // フィット関数に対する指数成分の値をセット
    t1 = -1/t1;
    A1 = nSign*exp(A1);
}
```

```

// 曲線から指数成分を除去
x_y_curve = x_y_curve - (y0 + A1 * exp(-x_data/t1));
// フィットしてピーク値を取得
xc = peak_pos(x_y_curve, &wG, &y0, &A2);
wL = wG;
// 編集可能部分の終了
}

```

Note:

自動初期化を行うにチェックを付けて、初期化コードを入力すると、これらのコードはパラメータ設定での初期値にも影響します。

曲線をフィットする

使用したパラメータ初期化の方法に関係なく、列 B を選択し、**Ctrl + Y** を押して、NLFit ダイアログを開き、ExpVoigt 関数を選んでフィットします。結果は次のようになります。

		値	標準誤差
Amplitude	y0	0.04862	0.00724
	A1	5.08842	0.02599
	t1	50.67096	0.51939
	xc	102.81043	0.07241
	A2	32.91106	0.92012
	wG	9.65255	0.67731
	wL	5.7529	0.81022

**区間ごとに関数でフィットする****内容**

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 サンプルとステップ](#)
 - [3.1 関数を定義する](#)
 - [3.2 曲線をフィットする](#)

サマリー

このチュートリアルでは、区間毎のフィット関数を定義する方法を説明します。

必要な Origin のバージョン:8.0 SR6

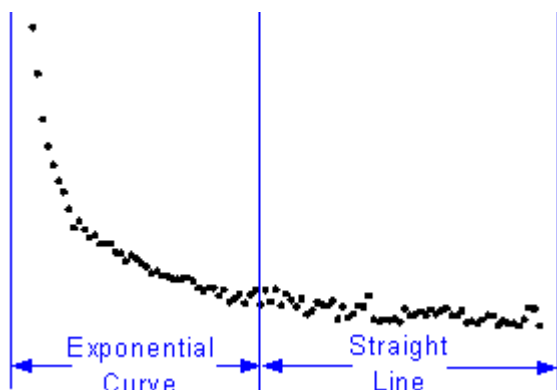
学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- 区間(条件)のフィット関数を定義する

サンプルとステップ

\Samples\Curve Fitting\Exponential Decay.dat ファイルをインポートして、このチュートリアルを開始します。列 D を選択し、散布図をプロットします。Growth/Sigmoidal カテゴリにある多くの組込関数を使ってこの曲線をフィットできますが、このチュートリアルでは、区間関数で曲線を 2 つの区間に分けます。




関数式は次のようなものです。

$$y = \begin{cases} a + bx + e^{-\frac{x-x_c}{t1}}, & \text{if } x < x_c \\ a + bx, & \text{if } x \geq x_c \end{cases}$$

関数を定義する

F9 を押し、フィット関数オーガナイザを開き、以下のように関数を定義します。

関数名:	piecewise
実現方式:	ユーザ定義
独立変数:	x
従属変数:	y
パラメータの名前:	xc, a, b, t1
定義形式:	Origin C
関数:	

関数編集ボックスの右にあるボタン  をクリックし、コードビルダで次のようにフィット関数を定義します。


```
void _nlsfpiecewise(  
// フィットパラメータ:  
double xc, double a, double b, double t1,  
// 独立変数:  
double x,  
// 従属変数:  
double& y)  
{  
    // 編集可能部分の開始  
    // if 条件で、曲線を分ける  
    if(x<xc) {  
        y = a+b*x+exp(-(x-xc)/t1);  
    } else {  
        y = a+b*x;  
    }  
    // 編集可能部分の終了  
}
```

曲線をフィットする

Ctrl + Y を押すと、グラフウィンドウをアクティブにして NLFit ダイアログが開きます。定義した *piecewise* 関数を選択し、次の値でパラメータを初期化します。

xc: 1

a: 1

b: -1

t1: 0.1

「フィット」ボタンをクリックし、結果を生成します。

xc: 0.24

a: 36.76585

b: -24.62876

t1: 0.04961

Note: この関数は、*xc* と *t1* に敏感で、異なる初期値を使うと結果も異なります。



特定の点を通るフィット曲線

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 サンプルとステップ](#)
 - [3.1 関数のパラメータを固定する](#)
 - [3.2 線形制約を使用する](#)
 - [3.3 重み付けを使用する](#)

サマリー

このチュートリアルはある特定の点を通りさせてフィットする方法を3つ紹介します。どの方法が最適かは、関数式とフィット曲線を通りさせたいデータポイントによります。

学習する項目

- フィット曲線が特定の点を通るようにするいくつかの方法を学習する
- 非線形フィットでフィットパラメータを固定する
- 非線形フィットで一般線形制約を利用する
- 重み付けをしてフィットする

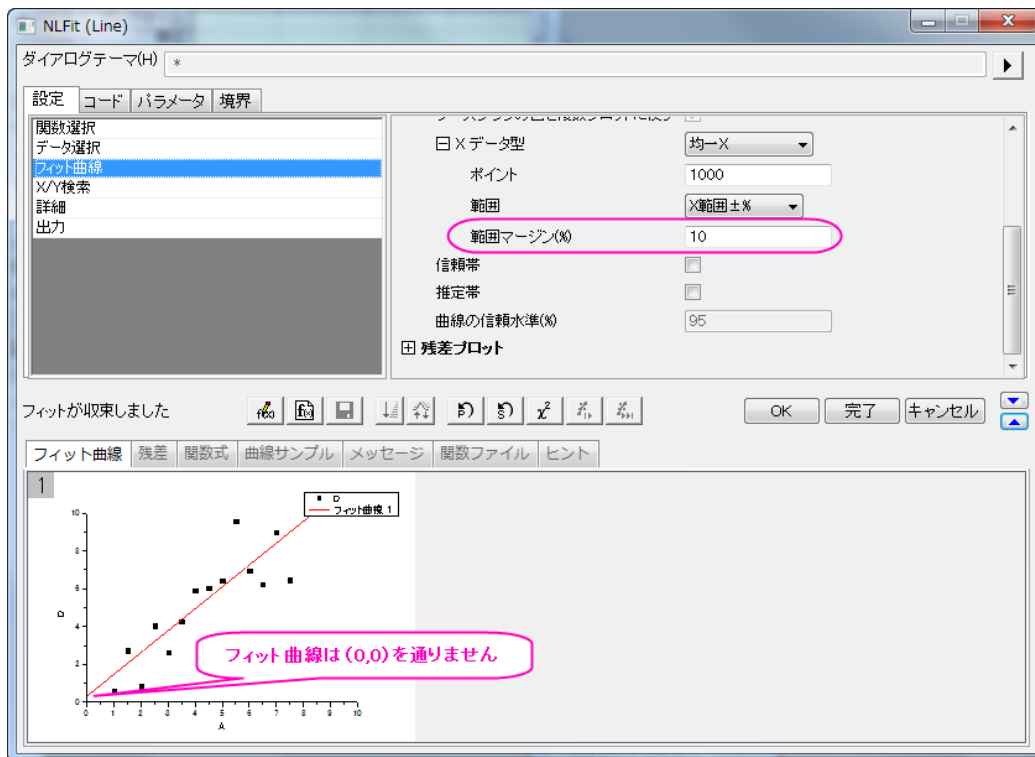
サンプルとステップ

関数のパラメータを固定する

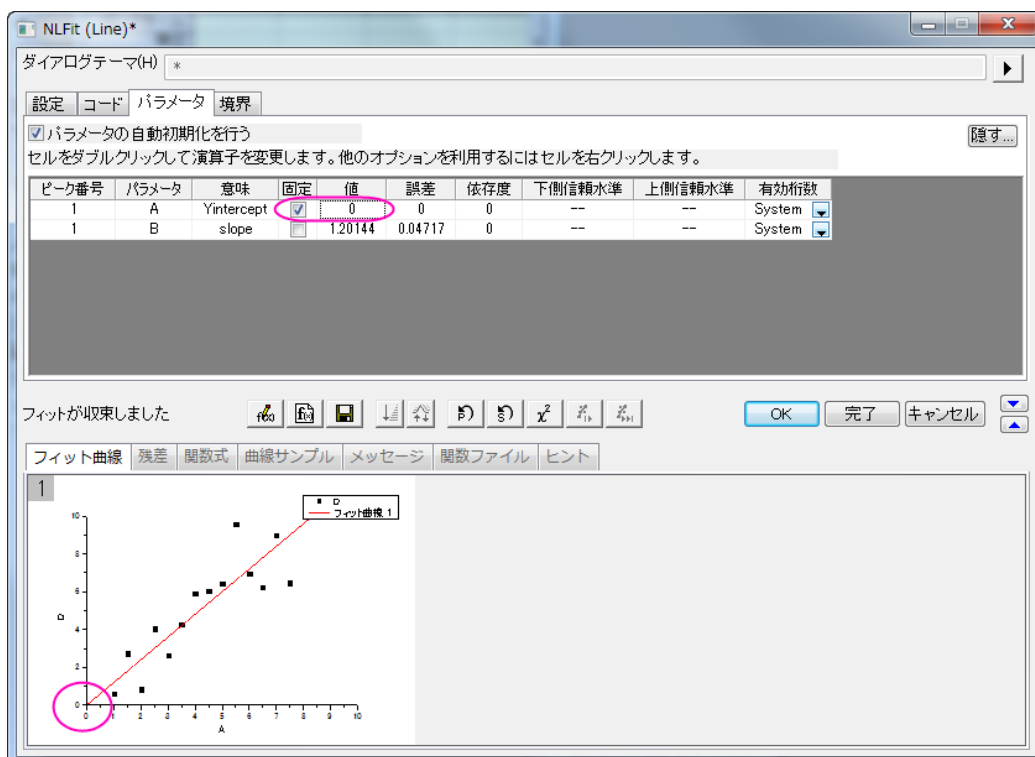
この方法はフィット曲線を通したポイントが関数のパラメータに関連している時のみ利用できます。典型的な例として、直線 $y = a + b * x$ をフィットする時に原点 (0,0) を通過するようにフィット線を作成する場合を紹介します。この場合、 $a = 0$ とすればフィット線は (0,0) を通過する事が分かります。

1. Origin のワークシートに `\Samples\Curve Fitting\Linear Fit.dat` をインポートします。
2. Y 属性の列、例えば列 D を選択し、**解析:フィット:非線形曲線フィット** とメニューから操作して **NLFit** ダイアログを開きます。
3. **Polynomial** のカテゴリを選択後、**Line** 関数を選択します。
4. **設定タブのフィット曲線** をクリックします。**X データ型** のブランチ内で **範囲オプション** が **X 範囲±%** になっていることを確認し、**範囲マージン(%)** の編集ボックスに **10** を入力します。このオプションを選択するとフィット曲線を延長できます。

5. 収束までフィットボタン  をクリックします。フィット曲線タブからも曲線が原点を通過していない事が分かります。



6. パラメータタブに行き、パラメータ A の固定チェックボックスにチェックを付け、値を 0 にします。収束までフィットボタンを再びクリックします。これで曲線が 0 を通過する事を確認できます。



Note:線形フィットダイアログ内の切片固定オプションを使用すると、強制的に原点を通過するように制御できます。


線形制約を使用する

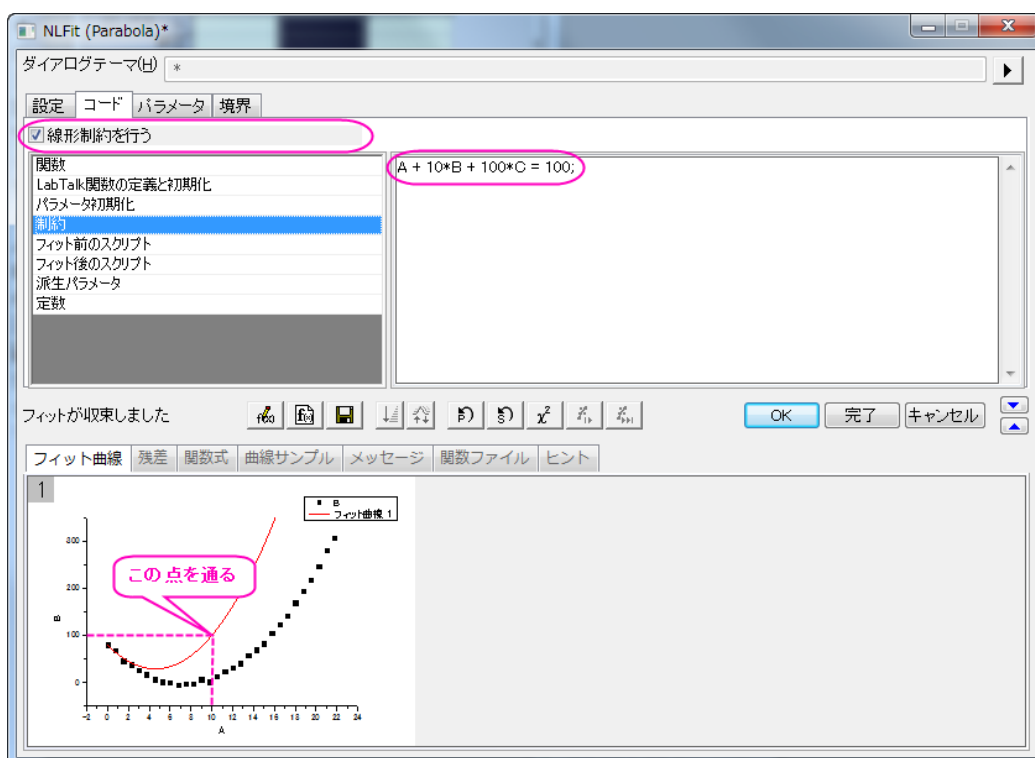
この方法はフィット関数が直線、2次曲線、3次曲線などのような線形モデルである事が条件です。

線形制約を利用して、フィット曲線を特定の点を通過させる方法を紹介します。

1. Origin のワークシートに "\Samples\Curve Fitting\Polynomial Fit.dat" のデータをインポートします。
2. 列 B を選択し、**Ctrl + Y** を押し、**NLFit** ダイアログを開きます。
3. **Polynomial** カテゴリで **Parabola** ($y = A + B * x + C * x^2$) を選択します。**フィット曲線** タブでは初期値がデータに良くフィットしていることが分かります。
4. 例えば、曲線を(10,100)の座標を通過するようにします。(10,100)をフィット関数 ($y = A + B * x + C * x^2$) を代入すると、 $100 = A + 10 * B + 100 * C$ となります。この数式を一般線形制約の条件として使用します。**コード** タブで制約を選択します。**線形制約を行う** にチェックをつけ、次の式を入力します。

$$A + 10 * B + 100 * C = 100$$

5. **収束までフィット** ボタン  をクリックします。フィット曲線はデータポイントとは違う事が分かりますが、特定の座標を通過していることが分かります。




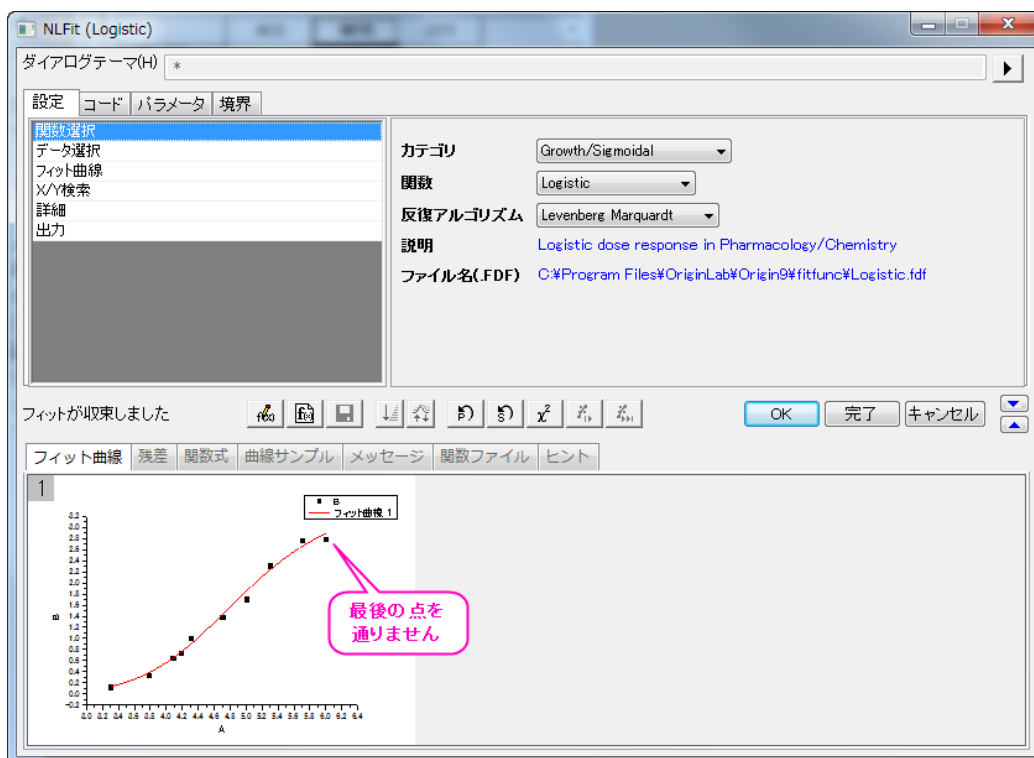
重み付けを使用する

パラメータが何かの固有値、例えば上部または下部の漸近線である時に、生データに通過させたい点が含まれている場合、より大きな重みを付ける事で特定の点を通過させることができます。この方法は決して分析的な結果ではありませんが、誤差を減らすために使用する事ができます。

1. データを準備するために、次のスクリプトを実行してください。


```
newbook;
string fname$ = system.path.program$;
fname$ += "Samples\Curve Fitting\Replicate Response Data.dat";
impasc fname$ options.PartImp.Partial:=1 options.PartImp.LastCol:=2;
wks.addcol();
col(a) = log(col(a)) + 5;
col(c)[1] = 100;
for(int ii = 2; ii < wks.maxrows; ii++)
{
    col(c)[ii] = 1;
}
col(c)[wks.maxrows] = 100;
```

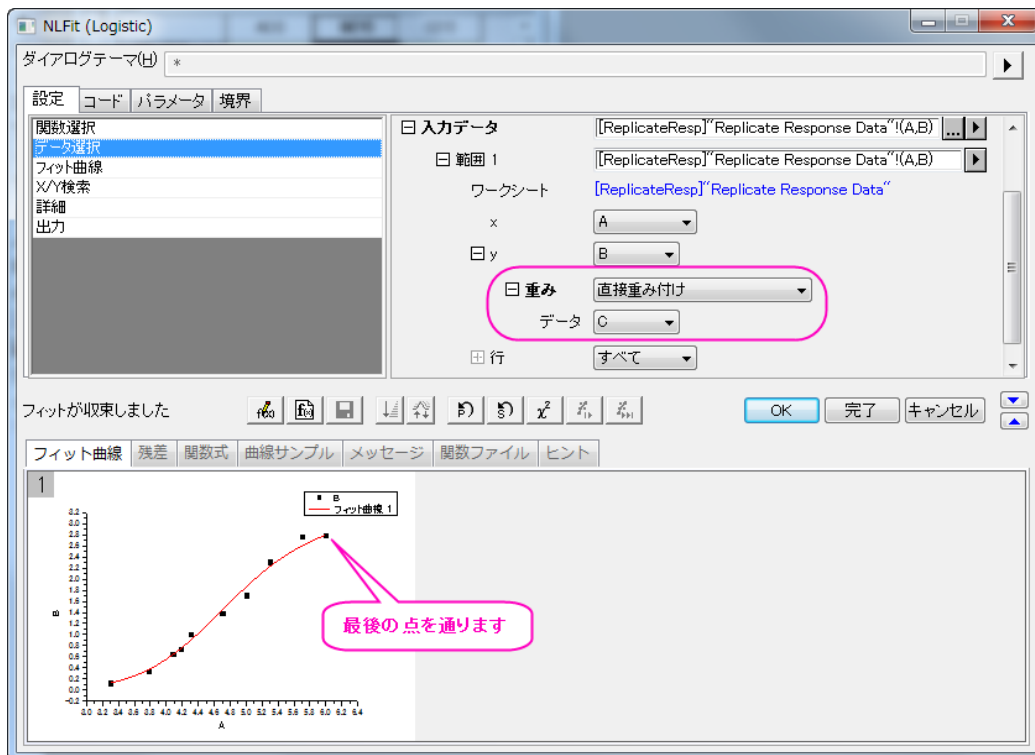
2. まずは重み付けがない場合でどのようにフィットするか確認しましょう。列 B を選択し、**解析:フィット:非線形曲線フィット**から NLFit ダイアログを開きます。**Growth/Sigmoidal** カテゴリから **Logistic** 関数を選びます。そして**収束までフィット**ボタンをクリックします。**フィット曲線**タブから、この曲線は上の方にある点をどこも通過しないことが分かります。



3. 生データのワークシートでは列 C を作成し、最初と最後の値を大きくしています。この列を重み付けの指標とすれば、この 2 点はフィット曲線により大きな影響を与え、強制的にこれら 2 点を通過するようになります。

	A(X)	B(Y)	C(Y)
ロングネーム			
1	3.30103	0.13136	100
2	3.77815	0.34384	1
3	4.07918	0.6554	1
4	4.17609	0.73699	1
5	4.30103	1.00157	1
6	4.69897	1.39062	1
7	5	1.70785	1
8	5.30103	2.31437	1
9	5.69897	2.77326	1
10	6	2.79321	100

設定タブにある、データ選択のページをアクティブにしましょう。以下のように入力データブランチを開き、重み付けオプションを表示します。直接重み付けをドロップダウンリストから選択し、データでは C を重み付けするデータセットとして選択します。そして収束までフィットボタン  をクリックします。



プレビューの結果から、フィット曲線が最初と最後のデータポイントを通過する事が分かります。



確率密度関数と累積分布関数による分布フィット

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 サンプルとステップ](#)
 - [3.1 フィットによる一般的なデータ分布の作成](#)
 - [3.2 確率密度関数によるフィット\(PDF\)](#)
 - [3.3 累積分布関数によるフィット\(CDF\)](#)

サマリー

データの統計検定を行うと、サンプル分布のスケールや位置を知ることができます。また、確率密度関数を使ってビン化したデータをフィットすると、これらの値を入手できます。このチュートリアルはこれらのパラメータを曲線フィットからどのように推定するか示します。

必要な Origin のバージョン: Origin 2016 SR6 以降

学習する項目

- フィットによる一般的なデータ分布の作成
- 確率密度関数によるフィット(PDF)
- 累積分布関数によるフィット(CDF)

サンプルとステップ

フィットによる一般的なデータ分布の作成

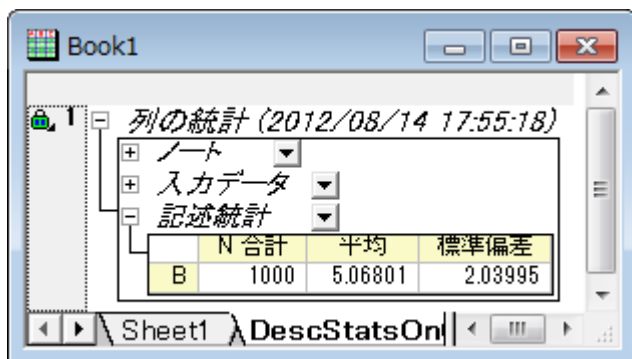
1. 以下のスクリプトを実行し、サンプルデータセットを準備してください。

```
newbook;  
col(2) = normal(1000) * 2 + 5;
```

このスクリプトは、平均がおおよそ 5 になり標準偏差(σ)がおおよそ 2 になる、一様に分布した 1000 ポイントを生成します。

2. まず、簡単な記述統計をこの列で行い、対応するモーメントの出力を確認しましょう。

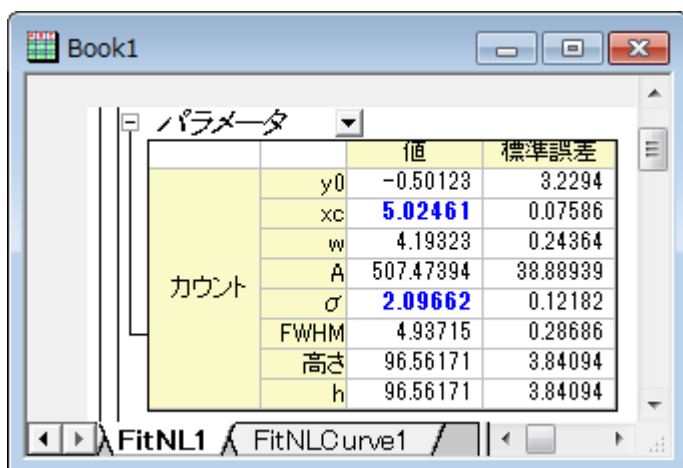
データ列を選択し、**統計: 記述統計: 列の統計**を選びダイアログを開きます。値 タブを開き、モーメント欄の平均と標準偏差のチェックボックスが選択されていることを確認します。OK をクリックして、レポートを作成します。



レポートワークシートから、平均と標準偏差がセットした値にとっても近いことが分かります。

確率密度関数によるフィット(PDF)

1. PDF でデータをフィットするには、ビンのデータを**度数カウント** ツールにて計算する必要があります。ソースデータの列を選択し、**統計: 記述統計: 度数表**をメニューから選びます。このダイアログでは、設定したビンサイズの区間ごとにいくつのデータが含まれるかを数える事ができます。
 - 計算制御ブランチを開き、増分のグループで**ビンサイズ**のラジオボタンが選択されている事を確認してください。**ビンサイズ**を 0.5 に設定します。(自動のチェックは外します)
 - 計算する値ブランチの下にある**ビンの中心**と**度数(カウント)**チェックボックスが選択されている事を確認します。OK をクリックしてデータを数えます。
2. FreqCounts1 のワークシートにある**カウント**列を選択し、**作図: 棒グラフ: 棒グラフ**を選択して棒グラフを作成します。元データのヒストグラムが作成されます。
3. グラフをアクティブにして、**解析: フィット: 非線形曲線フィット**と操作を行い、**NLFit** ダイアログを開きます。そして**Origin Basic Function** カテゴリから **Gauss** 関数を選びます。他の設定はデフォルトのまま、**フィット**ボタンをクリックしてフィットレポートを出力します。

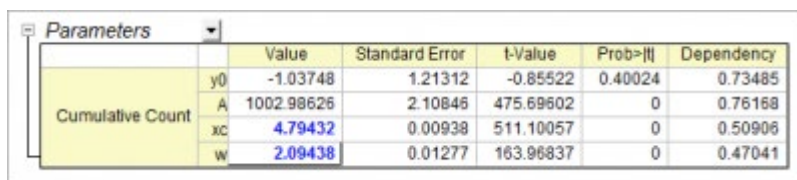


パラメータ		値	標準誤差
カウント	y0	-0.50123	3.2294
	xc	5.02461	0.07586
	w	4.19323	0.24364
	A	507.47394	38.88939
	σ	2.09662	0.12182
	FWHM	4.93715	0.28686
	高さ	96.56171	3.84094
	h	96.56171	3.84094

フィットレポートから、フィットした xc および σ が 5 および 2 に近いことが分かります。

累積分布関数によるフィット(CDF)

1. CDF でデータをフィットするには、累積ビンデータから始めます。前セクションの **FreqCounts1** シートの D 列、累積カウントを選択します 累積カウント列をハイライトします。メニューの作図>2次元: 散布図: 散布図を選択して CDF のポイントを作図します。
2. グラフをアクティブにして、解析:フィット:非線形曲線フィットと操作を行い、**NLFit** ダイアログを開きます。そして **Origin Basic Function** カテゴリから **Gauss** 関数を選びます。他の設定はデフォルトのまま、フィットボタンをクリックしてフィットレポートを出力します。



Parameters		Value	Standard Error	t-Value	Prob> t	Dependency
Cumulative Count	y0	-1.03748	1.21312	-0.85522	0.40024	0.73485
	A	1002.98626	2.10846	475.69602	0	0.76168
	xc	4.79432	0.00938	511.10057	0	0.50906
	w	2.09438	0.01277	163.96837	0	0.47041

フィットレポートから、フィットした xc および σ が 5 および 2 に近いことが分かります。



度数カウント ツールでビンデータを取得したあとは、ビンデータを、ユーザ定義の確率密度関数または累積度数関数にてフィットすることが出来ます。ユーザ定義関数の指定とフィットについてはこちらのページを参照してください



鋭いピークの関数を積分でフィットする

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 サンプルとステップ](#)
 - [3.1 データをインポート](#)
 - [3.2 フィット関数を定義する](#)
 - [3.3 曲線をフィットする](#)
 - [3.4 フィット結果](#)
 - [3.5 サンプルデータ](#)

サマリー

このチュートリアルでは積分関数内に鋭いピークを持つ積分フィット関数を定義し、その関数でデータをフィットする方法を示します。

積分関数内に鋭いピークを含んでいるので、それを狭い間隔で積分する必要があります。そのため、このピークを3つの部分に区分けして積分を行います。

必要な Origin のバージョン: Origin 9.0 SR0

学習する項目

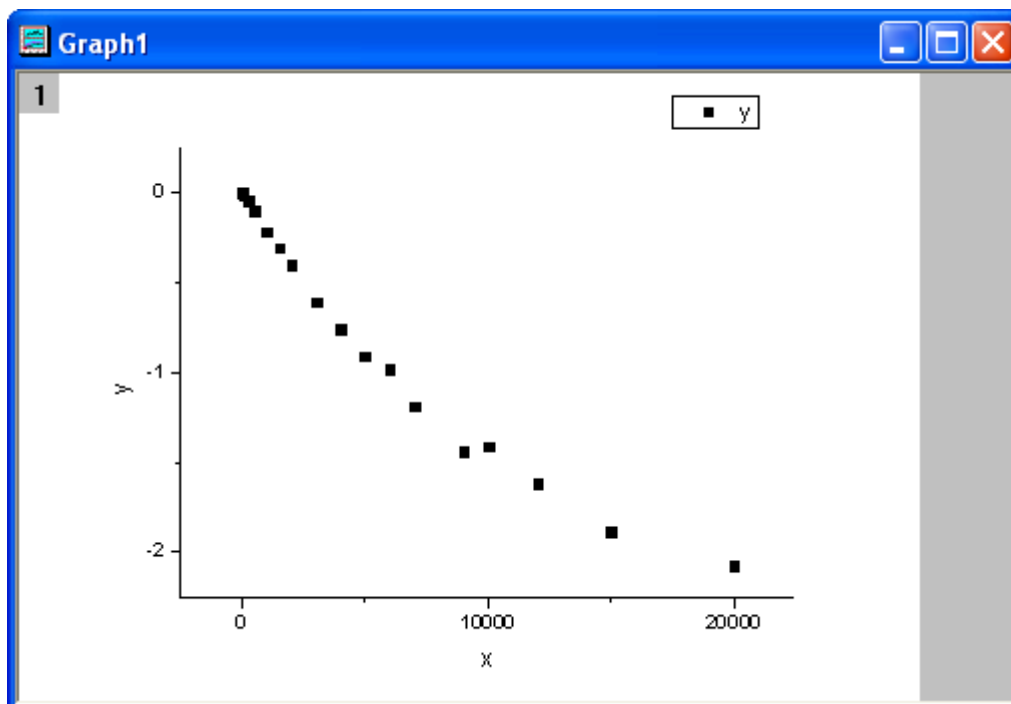
このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- 積分フィット関数を定義する
- 鋭いピークの関数を積分する
- 積分の区間を複数に区分けする

サンプルとステップ

データのインポート

1. 新規ワークブックを作成します。
2. [サンプルデータ](#) の内容をワークブックにコピーします。
3. 列 B を選択し、**作図:シンボル図:散布図**と操作します。グラフは次のようになります。



フィット関数を定義する

フィットする積分関数は次の式で表されます。

$$y = \log\left(\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{2\pi b}} e^{-\frac{(t-a)^2}{2b^2} - xt} dt\right)$$

a と b はフィット関数内のパラメータです。

初期パラメータ値は、a=1e-4, b=1e-4 となります。積分関数内には中心が a にあり、太さが 2b 程度のピークがあります。そして、ピークの幅(2e-4)は積分の範囲から見ても、とても狭いことが分かります。正しくピークの中心あたりで積分される事を確認するために、積分範囲である[0,1] は 3つの区分に分けられています。[0,a-5*b], [a-5*b,a+5*b], [a+5*b,1].この区分内で積分が施され、最終的に合計します。

フィット関数ビルダーツールでフィット関数を定義します。

1. ツール:フィット関数ビルダーをメニューから選択します。
2. フィット関数ビルダーダイアログの処理のゴールページで進むのボタンをクリックします。
3. 関数名と関数形式のページでは関数カテゴリーの選択/新規名称のドロップダウンリストから **User Defined** を選択します。次に関数名のエリアに `fintpeak` と入力し、関数形式で算術式を選びます。最後にフィット中に積分を実行のチェックを付けます。それから、進むボタンをクリックします。
4. 被積分関数ページでは被積分関数名の編集ボックス内に `myint` と入力します。そして、被積分関数の変数の編集ボックスには `t` を、引数の編集ボックスには `a, b, x` を入力します。被積分関数ボックスに次のスクリプトを入力します。

```
return 1/(sqrt(2*pi)*b)*exp(-(t-a)^2/(2*b^2)-x*t);
```

それから、進むボタンをクリックします。

5. 変数とパラメータのページでは、パラメータエリアに a, b を入力します。進むボタンをクリックします。
6. 式形式の関数ページのパラメータタブでは、パラメータ a と b の初期値を $1e^{-4}$ に設定します。それから被積分関数タブをクリックし、下限と上側限界の値をそれぞれ 0 と 1 に設定し、a, b, x の値はそれぞれ a, b, x と入力してください。
7. 式形式の関数ページで挿入ボタンをクリックします。クイックチェックのグループでは x=編集ボックスに 0 を入力し、評価ボタンをクリックします。すると、 $y=9.3e^{-21}$ と表示されるはずですが、 $x=0$ の時に y は 1 へ近づかないといけないので、このピークが正しく積分されなかったことが分かります。積分を 3 つに区分し、関数内容ボックスに次のスクリプトを入力します。

```
integral(myint, 0, a-5*b, a ,b ,x)+integral(myint, a-5*b, a+5*b, a ,b ,x)+
integral(myint, a+5*b, 1, a ,b ,x)
```

もう一度評価ボタンをクリックすると $y=0.84$ が表示され、今回は正確にピークが積分されたことが分かります。

8. 式形式の関数ページの関数内容ボックスを次のスクリプトで更新します。

```
log(integral(myint, 0, a-5*b, a ,b ,x)+integral(myint, a-5*b, a+5*b,
a ,b ,x)
+integral(myint, a+5*b, 1, a ,b ,x))
```

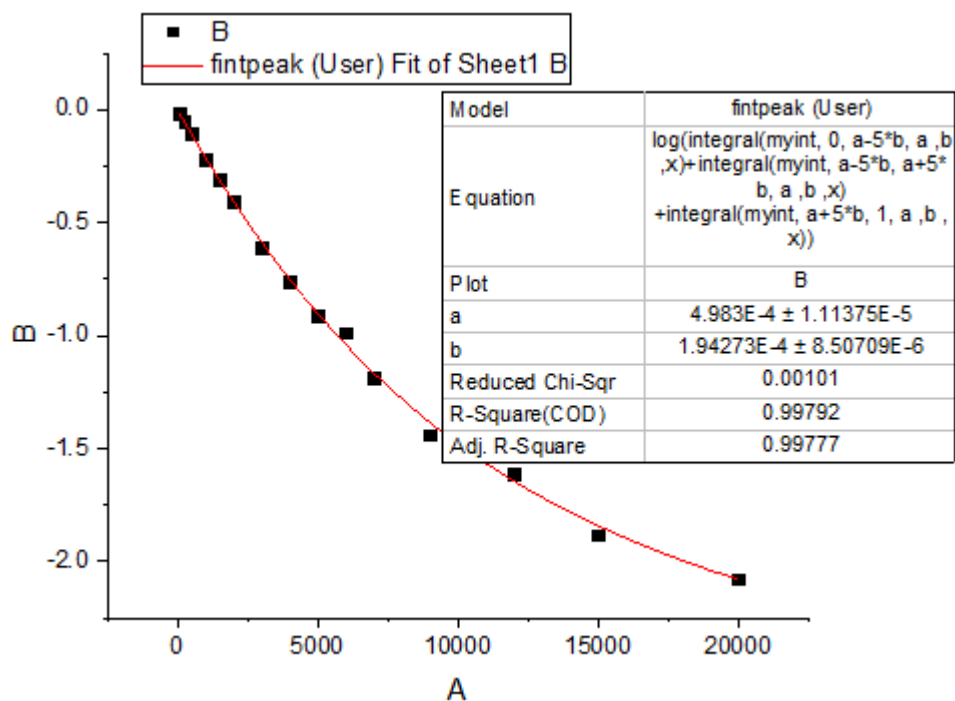
完了ボタンをクリックします。

曲線をフィットする

1. 解析:フィット:非線形曲線フィットをメニューから選択します。NLFit ダイアログで、設定タブを選択します。関数選択を選び、カテゴリドロップダウンリストから User Defined を選びます。そして関数ドロップダウンリストでは fintpeak 関数を選びます。Note: 初期パラメータはフィット関数の定義中に設定されています。
2. フィットボタンをクリックし、フィットを行います。

フィット結果

フィット曲線のグラフは次のようになります。



フィットパラメータは以下の通りです。

パラメータ	値	標準誤差
a	4.98302E-4	1.07593E-5
b	1.94275E-4	8.21815E-6

補正 R 二乗値は 0.99799 です。つまり、このフィット結果はとても良いことを示しています。

サンプルデータ

x	y
0	-0.00267
60	-0.01561
240	-0.05268
500	-0.10462
1000	-0.22092
1500	-0.31004
2000	-0.40695
3000	-0.61328
4000	-0.75884
5000	-0.9127
6000	-0.98605
7000	-1.18957
9000	-1.43831
10000	-1.41393
12000	-1.61458
15000	-1.88098
20000	-2.07792



区分線形関数を使ってフィットする

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 サンプルとステップ](#)
 - [3.1 データをインポートする](#)
 - [3.2 フィット関数を定義する](#)
 - [3.3 交点と傾きとなる派生パラメータを定義する](#)
 - [3.4 曲線をフィットする](#)
 - [3.5 フィット結果](#)

サマリー

このチュートリアルでは 2 つの線形区分から成る区分線形関数を定義してデータのフィットを実行し、結果から求められる交点位置を計算する方法を示します。

必要な Origin のバージョン: Origin 8.6 SR0


学習する項目

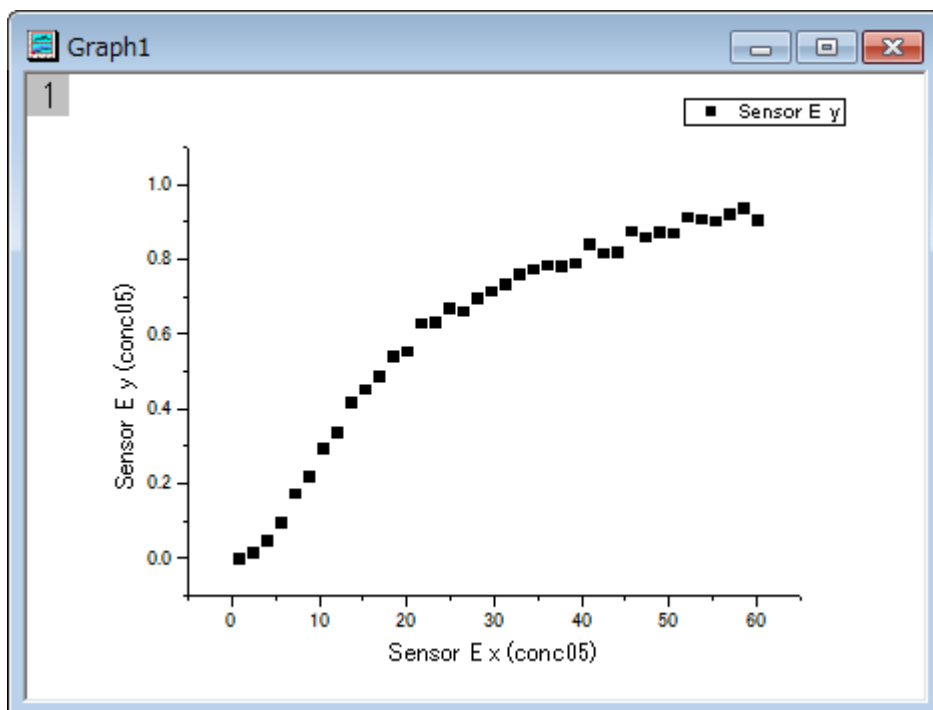
このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- 区間(条件)のフィット関数を定義する
- パラメータの自動初期化
- 区間フィットの交差位置を計算する

サンプルとステップ

データのインポート

1. 新規ワークブックを作成します。
2. **単一 ASCII ファイルインポート** ボタン  をクリックし、ダイアログボックスを開きます。Samples\Curve Fitting フォルダに移動し、Step01.dat ファイルを開きます。
3. **Sensor E x** 列(列 J) を右クリックし、コンテキストメニューから **列 XY 属性の設定: X 列** を選びます。Sensor E y 列を選択し、メニューから **作図: シンボル図: 散布図** と操作します。グラフは次のようになります。




フィット関数を定義する

上記のグラフから曲線は2つの部分に分けられる部分からできていることがわかります。これは区分的線形関数を使えばフィットできます。この関数は次のように表現できます。

$$y = \begin{cases} \frac{y_1(x_3 - x) + y_3(x - x_1)}{x_3 - x_1}, & \text{if } x < x_3 \\ \frac{y_3(x_2 - x) + y_2(x - x_3)}{x_2 - x_3}, & \text{if } x \geq x_3 \end{cases}$$

x_1 と x_2 は曲線の終着点を示す x 値で、フィット中に固定されます。 x_3 は2つの部分の交点の x 値を示しています。そして y_1 、 y_2 、 y_3 は x_i , $i = 1, 2, 3$ 地点での y 値をそれぞれ表しています。

フィット関数ビルダーツールでフィット関数を定義します。

1. メニューから、ツール:フィット関数ビルダーをメニューから選択します。
2. フィット関数ビルダーダイアログの処理のゴールページで進むのボタンをクリックします。
3. 関数名と関数形式のページでは関数カテゴリーの選択/新規名称のドロップダウンリストから **User Defined** を選択します。次に関数名のエリアに `pwl2s` と入力し、関数形式で **OriginC** を選びます。それから、進むボタンをクリックしましょう。
4. 変数とパラメータのページでは、パラメータエリアに `x1,y1,x2,y2,x3,y3` を入力します。進むボタンをクリックします。
5. **OriginC** フィット関数ページで、関数内容編集ボックスの右側にある  ボタンをクリックし、フィット関数をコードビルダーで次のように定義します。


```

if( x < x3 )
    y = (y1*(x3-x)+y3*(x-x1))/(x3-x1);
else
    y = (y3*(x2-x)+y2*(x-x3))/(x2-x3);

```

コンパイルボタンをクリックして関数内容をコンパイルします。**NLSFに戻る**ボタンをクリックします。**進む**ボタンをクリックします。

6. パラメータ初期化ルーチンページでは、初期化コード編集ボックスの右にある  ボタンをクリックしてフィットパラメータの初期化をコードビルダで定義します。

```

int n1, n2, n3;

x_data.GetMinMax( x1, x2, &n1, &n2 );
x3 = x1 + (x2 - x1)/2;

y1 = y_data[n1];
y2 = y_data[n2];

vector vd;
vd = abs( x_data - x3 );
double xta, xtb;
vd.GetMinMax( xta, xtb, &n3 );
y3 = y_data[n3];

```

コンパイル ボタンをクリックしてコンパイルします。**NLSFに戻る**ボタンをクリックします。**完了**ボタンをクリックします。

交点と傾きとなる派生パラメータを定義する

関数を定義する手順の途中でも、追加で派生パラメータ、例えば傾きや交点となる値を定義できます。これらの値はフィットの処理が完了した後の関数パラメータから計算されます。

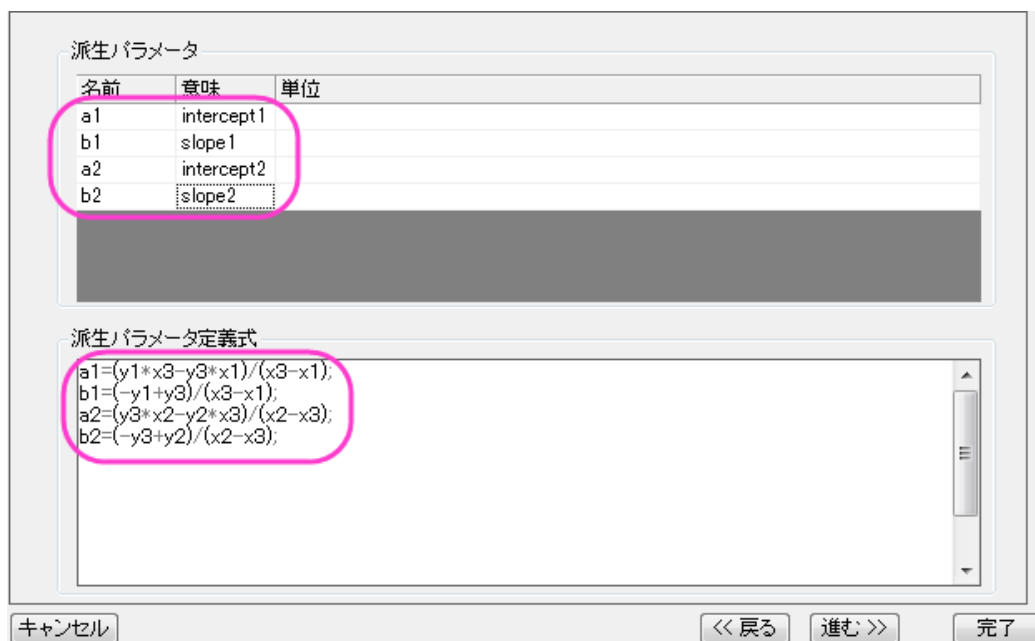
1. <<戻るボタンを2回クリックして**変数とパラメータ**ページに戻ります。そこで**派生パラメータ**のボックスに **a1,b1,a2,b2** と入力します。
2. **進む**ボタンを4回押して**派生パラメータ**ページに進みます。上の表の**意味列**を入力し、下の**派生パラメータ定義式**には次の数式を入力して**完了**ボタンをクリックします。

$$a1=(y1*x3-y3*x1)/(x3-x1);$$

$$b1=(-y1+y3)/(x3-x1);$$

$$a2=(y3*x2-y2*x3)/(x2-x3);$$

$$b2=(-y3+y2)/(x2-x3);$$



曲線をフィットする

1. **解析:フィット:非線形陰関数曲線フィット**をメニューから選択します。**NLFit** ダイアログで、**設定**タブを選択します。
NLFit ダイアログで、**設定:関数選択**を選び、**カテゴリ**ドロップダウンリストから **User Defined** を選びます。そして**関数**ドロップダウンリストでは **pwl2s** を選びます。
2. **NLFit** ダイアログで**パラメータ**タブを選択し、このパラメータ、**x1** と **x2** を下図のように**固定**します。

設定 コード パラメータ 境界

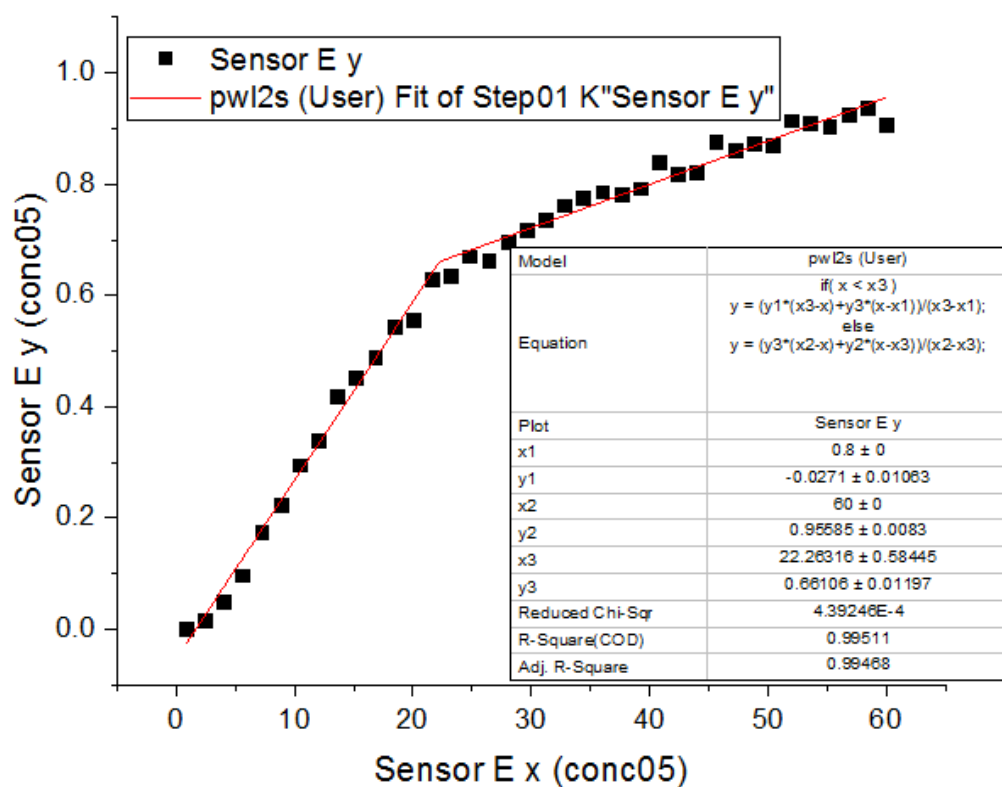
パラメータの自動初期化を行う
セルをダブルクリックして演算子を変更します。他のオプションを利用

ピーク番号	パラメータ	意味	固定	値	誤差	依存度
1	x1	?	<input checked="" type="checkbox"/>	0.8	--	--
1	y1	?	<input type="checkbox"/>	0	--	--
1	x2	?	<input checked="" type="checkbox"/>	60	--	--
1	y2	?	<input type="checkbox"/>	0.90662	--	--
1	x3	?	<input type="checkbox"/>	30.4	--	--
1	y3	?	<input type="checkbox"/>	0.73608	--	--

3. **フィット**ボタンをクリックし、フィットを行います。

フィット結果

フィット曲線のグラフは次のようになります。



フィットパラメータは以下の通りです。

パラメータ	値	標準誤差
x1	0.8	0
y1	-0.0271	0.01063
x2	60	0
y2	0.95585	0.0083
x3	22.26316	0.58445
y3	0.66106	0.01197
a1	-0.05275	0.01123
b1	0.03206	8.7153E-4
a2	0.48715	0.01664
b2	0.00781	3.86455E-4

この2つの区分の交点は(22.26316, 0.66106)となります。

Note: 区分線形関数で2つ以上の区分にフィットする場合も同様の手順で行えます。

常微分方程式によるフィット

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 サンプルとステップ](#)
 - [3.1 データをインポート](#)
 - [3.2 関数を定義する](#)
 - [3.3 曲線をフィットする](#)
 - [3.4 フィット結果](#)

サマリー

このチュートリアルでは、**フィット関数ビルダー**を使用して常微分方程式 (ODE) を作成し、この関数を使用してデータのフィットを実行する方法をご紹介します。

必要な Origin のバージョン: Origin 9.1 SR0 以降

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について解説します。

- ODF フィット関数を定義する
- OriginC コードを使用して NAG 関数を呼び出す
- パラメータが更新されたときのみ ODE 結果を再計算する
- ODF 結果の補間

3 サンプルと操作


このチュートリアルでは、以下のサンプルのような、1 階常微分方程式 を使用します。

$$\frac{dy}{dx} = ay$$

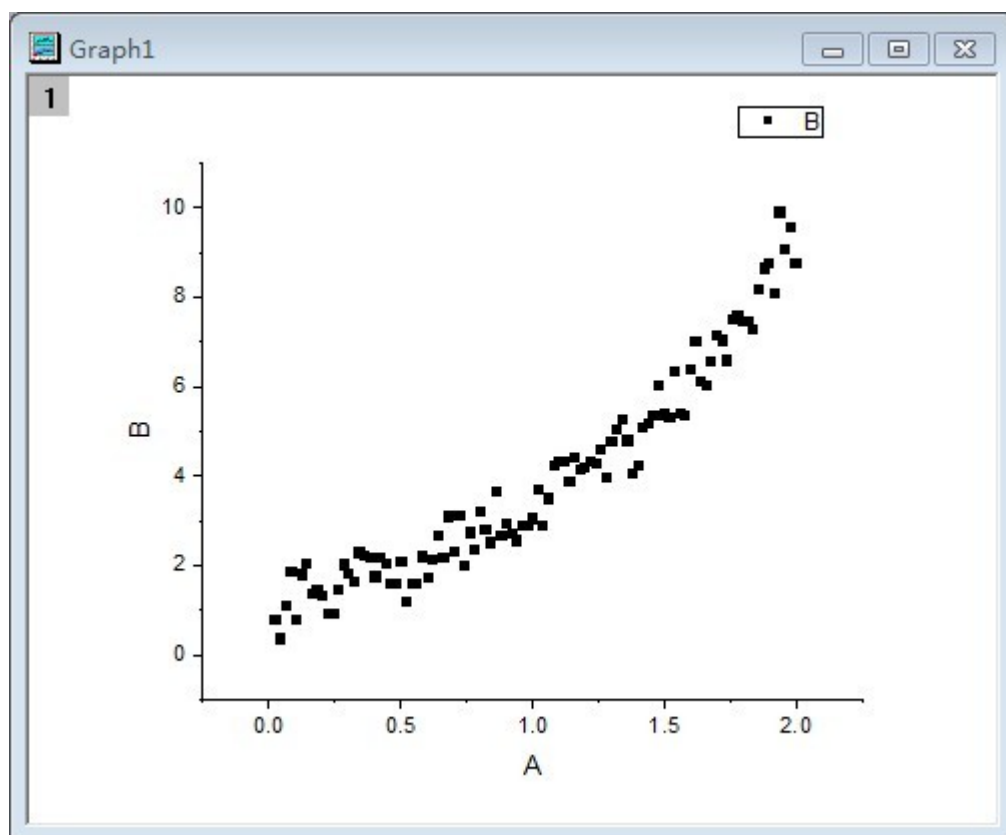
$$y|_{x=x_0} = y_0$$

ここで、**a** は常微分方程式 のパラメータで、**y₀** は ODE の初期値です。この ODE の問題を解くために、Runge-Kutta メソッドを使用して、NAG 関数 **d02pvc** と **d02pcc** が呼び出されます。

データのインポート


1. 新規ワークブックを作成します。
2. **単一 ASCII ファイルインポート** ボタン  をクリックし、「ASCII」ダイアログボックスを開きます。 **Samples\Curve Fitting** フォルダの、**Exponential Growth.dat** ファイルを選択し、開きます。

3. B 列を選択して、Origin のメニューから作図: シンボル図: 散布図を選択します。グラフは次のようになります。



フィット関数を定義する

フィット関数は、フィット関数ビルダーを使用して定義できます。

1. メニューから、ツール: フィット関数ビルダーを選択します。
2. 開いたフィット関数ビルダーの処理のゴールページで、新しい関数の作成が選択されているの確認します。進むボタンをクリックします。
3. 関数名と関数形式のページでは、関数カテゴリーの選択ドロップダウンリストで **User Defined** を選択し、関数名を **FitODE** とします。関数形式は、**Origin C** にします。進むボタンをクリックします。進むをクリックします。
4. 変数とパラメータページでは、パラメータとして、**a, y0** と入力します。進むをクリックします。
5. **Origin C** フィット関数のページで、関数内容編集ボックスの右上にある、 ボタンをクリックしてコードビルダを開き、関数を以下のように定義します。NAG とフィットのためにヘッダファイルを含めます。

```
#include <oc_nag.h>
#include <ONLSF.H>
```

NAG 関数を呼び出して、ODE を解くための静的な関数を定義します。NAG 関数 **d02pvc** を呼び出して、ODE モデルを確立し、**d02pcc** でモデルを解きます。

```
struct user // ODE のパラメータ
{
    double a;
};
//微分方程式を定義: y'=a*y
static void NAG_CALL f(Integer neq, double t, double y[], double yp[],
Nag_User *comm)
{
    neq; //上部分方程式の数
    t; //独立変数
    y; //従属変数
    yp; //一次微分

    struct user *sp = (struct user *) (comm->p);
    double a;

    a = sp->a;

    yp[0] = a*y[0];
}
//ルンゲクッタ ODE23 を使って、ODE を解く
static bool nag_ode_fit( const double a, const double y0, const double
tstart,
    const double tend, const int nout, vector &vP )
{
    //nout: 出力点数(Number of points to output)
    if( nout < 2 )
        return false;

    vP.SetSize( nout );
    vP[0] = y0;

    int neq = 1; //微分方程式の数
    Nag_RK_method method;

    double hstart, tgot, tinc;

    double tol, twant;
    int i, j;

    vector thres(neq), ygot(neq), ymax(neq), ypgot(neq), ystart(neq);

    Nag_ErrorAssess errass;
    Nag_ODE_RK opt;
    Nag_User comm;

    struct user s;
    s.a = a;
    comm.p = (Pointer)&s;
```

```

ystart[0] = y0;
for (i=0; i<neq; i++)
    thres[i] = 1.0e-8;
errass = Nag_ErrorAssess_off;
hstart = 0;
method = Nag_RK_2_3;

tinc = (tend-tstart)/(nout-1);

tol = 1.0e-3;

NagError nagErr1;
//ODEを設定
d02pvc(neq, tstart, ystart, tend, tol, thres, method,
    Nag_RK_range, errass, hstart, &opt, &nagErr1);

if( nagErr1.code != NE_NOERROR )
    return false;

for (j=1; j<nout; j++)
{
    twant = tstart + j*tinc;

    NagError nagErr2;
    //ODEを解
    d02pcc(neq, f, twant, &tgot, ygot, ypgot, ymax, &opt, &comm,
&nagErr2);

    if( nagErr2.code != NE_NOERROR )
        return false;

    vP[j] = ygot[0];
}
//ルンゲクッタスイート用の free 関数
d02ppc(&opt);
return true;
}

```

フィット関数内容_nlsfFitODE を定義

```

NLFitContext *pCtxt = Project.GetNLFitContext();
if ( pCtxt )
{
    static vector vX, vY;
    static int nSize;
    BOOL bIsNewParamValues = pCtxt->IsNewParamValues();
    // パラメータを更新したら、ODEの結果を再計算します
    if ( bIsNewParamValues )
    {
        //独立変数の初期値と最終値
        double tstart = 0.02, tend = 2, tinc;
        int nout = 100; //ポイント数
    }
}

```

```

tinc = (tend-tstart)/(nout-1);
vX.Data( tstart, tend, tinc );
nSize = vX.GetSize();

if( !nag_ode_fit( a, y0, tstart, tend, nout, vY ) )
    return;
}

//ODEの結果でデータxをフィットして、yを補間
ocmath_interpolate( &x, &y, 1, vX, vY, nSize );
}

```

コンパイルボタンをクリックして関数内容をコンパイルします。**NLSFに戻る**ボタンをクリックし、戻ります。ダイアログの人が走っているマークのボタンは**評価**ボタンです。これをクリックすると、 $y=2.6627270424371$ と表示されます。関数が動作することを意味します。**進む**をクリックします。

6. パラメータの初期化コードのページで、**カスタムコードを使用する**のラジオボタンを選択して、**初期化ボックス**のコードを入力します。

```

// y0の初期値として、フィットデータのyの開始値をセット
y0 = y_data[0];
a = 1;

```

完了ボタンをクリックします。

Note:NLFitContext class でフィットしたパラメータを確認できます。

曲線をフィットする

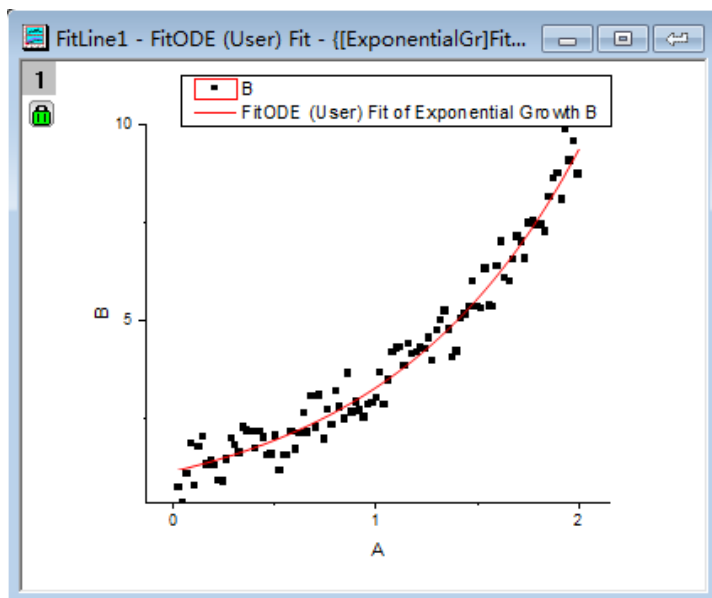
1. **B**列を選択して、Originメニューから、**解析:フィット:非線形曲線フィット**を選択します。開いた**NLFit**ダイアログの、**設定:関数選択**のページで、**カテゴリ**ドロップダウンリストから **User Defined** を選択し、**関数**ドロップダウンリストから **FitODE** を選択します。
2. **パラメータ**タブを開き、下図のように **y0** を固定します。

ピーク番号	パラメータ	意味	固定	値	誤差	依存度	下側信頼水準
1	a	?	<input type="checkbox"/>	1	--	--	--
1	y0	?	<input checked="" type="checkbox"/>	0.77038	--	--	--

3. **フィット**ボタンをクリックして、曲線をフィットします。

フィット結果

グラフは下図のようになります。



フィットパラメータは以下ようになります

パラメータ	値	標準誤差
a	1.30272	0.00858
y0	0.77038	0

Note: より複雑な ODE フィット関数を使用したフィットも同様の方法で実行できます。



2 種類の関数を使ってコンボリレーションフィットを行う

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 サンプルとステップ](#)
 - [3.1 データをインポートする](#)
 - [3.2 フィット関数を定義する](#)
 - [3.3 曲線をフィットする](#)
 - [3.4 フィット結果](#)

サマリー

このチュートリアルでは、2つの関数を使用したコンボリユーションフィットを行う方法と、等間隔ではない X データをこの関数でフィットする方法を示します。



もし、使うデータが Gauss と指数関数のコンボリユーションの場合、組み込み関数である **Peak Functions** カテゴリ内にある GaussMod を使って直接データをフィットできます。

必要な Origin のバージョン: Origin 9.0 SR0


学習する項目

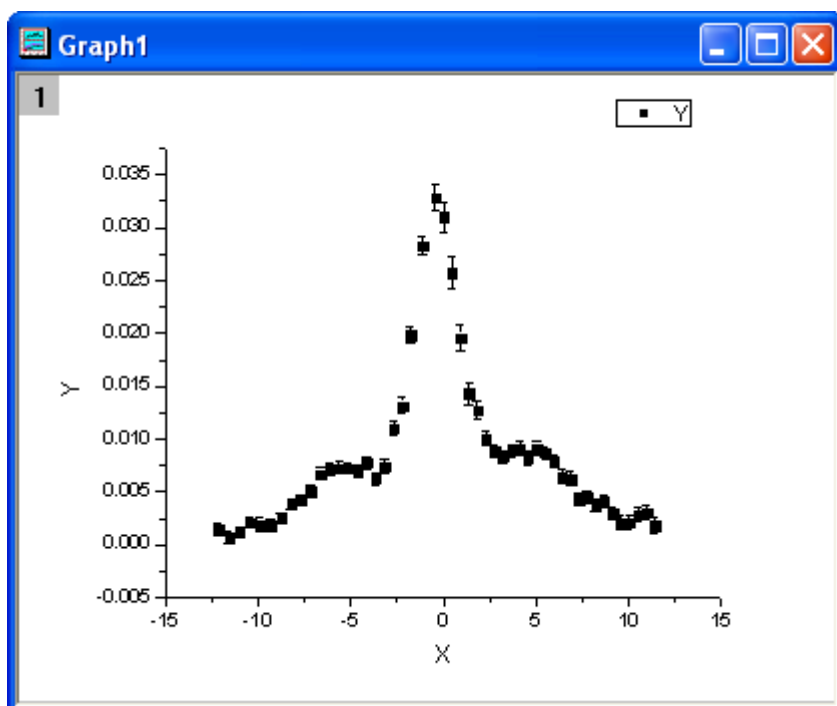
このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- 関数を作成する
- 二つの関数のコンボリユーションを計算する
- フィット関数の定数を定義する
- コンボリユーション前に 0 でパッドする
- 不均等な X 値に対してコンボリユーション結果を補間する
- パラメータを使用して精度とスピードのバランスをとる
- Y エラーバーを重み付けとして利用する

サンプルとステップ

データのインポート

1. 新規ワークブックを作成します。
2. **単一 ASCII ファイルインポート** ボタン  をクリックし、ダイアログボックスを開きます。Samples\Curve Fitting フォルダに移動し、ConvData.dat ファイルを開きます。列 A は等間隔データではないことが分かります。(LabTalk の diff 関数を使って真偽を確かめられます。)
3. 列 C で右クリックし、ショートカットメニューから「列 XY 属性の設定: Y エラーバー」を選択します。列 B と列 C を選択し、メニューから **作図: シンボル図: 散布図: 下・左軸** と操作します。グラフは次のようになります。



フィット関数を定義する

フィット関数は 2 関数のコンポリューション関数を使用します。これは次式のように定義されます。

$$y = y_0 + b_1x + \frac{b_2 A_2}{w_2 \sqrt{\pi/2}} e^{-\frac{2(x-x_{c2})^2}{w_2^2}} + (f * g)(x)$$

上記において、 $f(x) = \frac{s}{\pi} \cdot \frac{\tau_L x_0^2 (x_L^2 - x_0^2)}{(x - x_{c1}) \tau_L ((x - x_{c1})^2 - x_L^2)^2 + ((x - x_{c1})^2 - x_0^2)^2}$ です。

$$g(x) = \frac{1}{w_1 \sqrt{\pi/2}} e^{-\frac{2x^2}{w_1^2}}$$

そして $x_0, x_L, \tau_L, s, y_0, b_1, b_2$ はフィットパラメータです。 $w_1, x_{c1}, w_2, x_{c2}, A_2$ は、フィット関数の定数になります。フィット関数は、**フィット関数ビルダー**を使用して定義できます。


1. メニューから、**ツール:フィット関数ビルダー**をメニューから選択します。
2. **フィット関数ビルダー**ダイアログの**処理のゴールページ**で**進む**をクリックします。
3. **関数名と関数形式**のページでは**関数カテゴリーの選択/新規名称**のドロップダウンリストから **User Defined** を選択します。次に**関数名**のエリアに **convfunc** と入力し、**関数形式**で **OriginC** を選びます。それから、**進む**をクリックしましょう。
4. **変数とパラメータ**ページでは **x0,xL,tL,s,y0,b1,b2** を**パラメータ**エリアに入力し、**w1,xc1,w2,xc2,A2** を**定数**エリアに入れます。**進む**をクリックします。

5. OriginC フィット関数ページでは、次のように初期パラメータを設定します。

```
x0 = 3.1
xL = 6.3
tL = 0.4
s = 0.14
y0 = 1.95e-3
b1 = 2.28e-5
b2 = 0.2
```

定数タブを開き、下記のように定数を設定します。

```
w1 = 1.98005
xc1 = -0.30372
w2 = 5.76967
xc2 = 3.57111
A2 = 9.47765e-2
```

関数内容ボックスの右にあるボタン  をクリックし、コードビルダで次のようにフィット関数を定義します。

ヘッダファイルを含みます。

```
#include <ONLSF.H>
#include <fft_utils.h>
```

関数本体を定義します。

```
NLFitContext *pCtxt = Project.GetNLFitContext();
if ( pCtxt )
{
    // 各印手レーションは Vector 型で返します。
    static vector vX, vY;

    static int nSize;

    BOOL bIsNewParamValues = pCtxt->IsNewParamValues();

    // パラメータが更新されると、コンボリューション結果を再計算します。
    if ( bIsNewParamValues )
    {
        // サンプル間隔
        double dx = 0.05;
        vX.Data(-16.0, 16.0, dx);
        nSize = vX.GetSize();

        vector vF, vG, vTerm1, vTerm2, vDenominator, vBase, vAddBase;

        double Numerator = tL * x0^2 * (xL^2 - x0^2);
```

```

vTerm1 = ( (vX - xc1) * tL * ( (vX - xc1)^2 - xL^2 ) )^2;
vTerm2 = ( (vX - xc1)^2 - x0^2 )^2;
vDenominator = vTerm1 + vTerm2;

//関数 f(x)
vF = (s/pi) * Numerator / vDenominator;

//関数 g(x)
vG = 1/(w1*sqrt(pi/2))*exp(-2*vX^2/w1^2);

//コンボリューションを行う前に、 f と g にゼロをあてる
vector vA(2*nSize-1), vB(2*nSize-1);
vA.SetSubVector( vF );
vB.SetSubVector( vG );

//円形コンボリューションの実行
int iRet = fft_fft_convolution(2*nSize-1, vA, vB);

//最初と最後を切り取る
vY.SetSize(nSize);
vA.GetSubVector( vY, floor(nSize/2), nSize + floor(nSize/2)-1 );

//基線
vBase = (b1*vX + y0);
vAddBase = b2 * A2/(w2*sqrt(pi/2))*exp( -2*(vX-xc2)^2/w2^2 );

//フィットした Y
vY = dx*vY + vBase + vAddBase;
}

//コンボリューションの結果のフィットデータで x から y を補間する
ocmath_interpolate( &x, &y, 1, vX, vY, nSize );
}

```

コンパイルボタンをクリックして関数内容をコンパイルします。**NLSFに戻る**ボタンをクリックします。

評価ボタンをクリックすると、 $x=1$ で $y=0.02165$ を表示します。これは、定義した関数が正しい事を示しています。

進むをクリックします。

6. 進むをクリックします。境界条件と一般線形制約ページでは、以下のような範囲を定義します。

```

0 < x0 < 7
0 < xL < 10
0 < tL < 1
0 <= s <= 5
0 < b2 <= 3

```

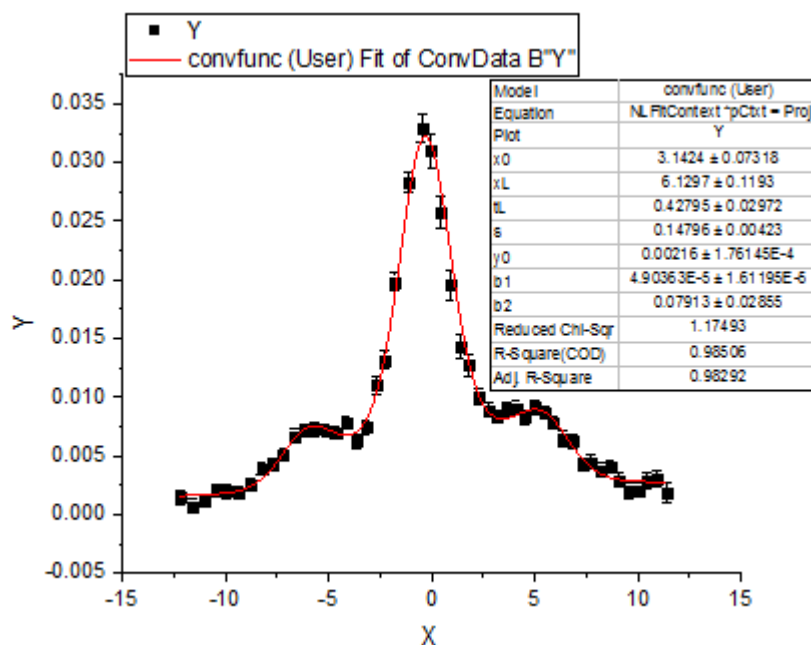
完了をクリックします。

曲線をフィットする

1. **解析:フィット:非線形曲線フィット**をメニューから選択します。**NLFit** ダイアログで、**設定:関数選択**を選び、**カテゴリ**ドロップダウンリストから **User Defined** を選びます。そして**関数**ドロップダウンリストでは **convfunc** を選びます。アクティブグラフ内で **Y エラーバー**が表示されているので、列 C が Y の重み付けとして使われ、**機械的ウェイト法**がデフォルトで定義されています。
2. **フィットボタン**をクリックし、フィットを行います。

フィット結果

フィット曲線のグラフは次のようになります。



フィットパラメータは以下の通りです。

パラメータ	値	標準誤差
x0	3.1424	0.07318
xL	6.1297	0.1193
tL	0.42795	0.02972
s	0.14796	0.00423
y0	0.00216	1.76145E-4
b1	4.90363E-5	1.61195E-5
b2	0.07913	0.02855

フィット関数の本体では **dx** に小さな値を入力でき結果はより正確になりますが、フィットが収束するまで時間がかかる事があります。



有理関数のパラメータ初期化

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 サンプルとステップ](#)
 - [3.1 アルゴリズム](#)
 - [3.2 データをインポートする](#)
 - [3.3 フィット関数の定義とパラメータの初期化](#)
 - [3.4 曲線をフィットする](#)
 - [3.5 フィット結果](#)
 - [3.6 サンプルデータ](#)

サマリー

このチュートリアルでは、複数線形回帰法を使って有理フィット関数の初期パラメータを計算する方法を示します。また、計算された初期パラメータを使用してフィットを実行します。

必要な Origin のバージョン: Origin 9.0 SR0 以降

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について解説します。

- 有理フィット関数用の初期パラメータを計算する
- OriginC のコードを使って複数の線形回帰を行う

サンプルとステップ

アルゴリズム

このチュートリアルでは、次の有理関数を例として使用します。

$$y = \frac{a + bx + cx^2}{1 + dx + ex^2}$$

x は独立変数、**y** は従属変数、**a, b, c, d, e** は全てフィットパラメータです。

両辺を右辺の分母で掛けると、次のようになります。

$$y + dxy + ex^2y = a + bx + cx^2$$

この数式は次のように表現できます。

$$y = a + bx + cx^2 - dxy - ex^2y$$

フィットデータ (x_i, y_i) $i = 1 \dots N$ を数式に代入すると、次のようになります。

$$\begin{cases} a + bx_1 + cx_1^2 - dx_1y_1 - ex_1^2y_1 = y_1 \\ a + bx_2 + cx_2^2 - dx_2y_2 - ex_2^2y_2 = y_2 \\ \vdots \\ a + bx_N + cx_N^2 - dx_Ny_N - ex_N^2y_N = y_N \end{cases}$$

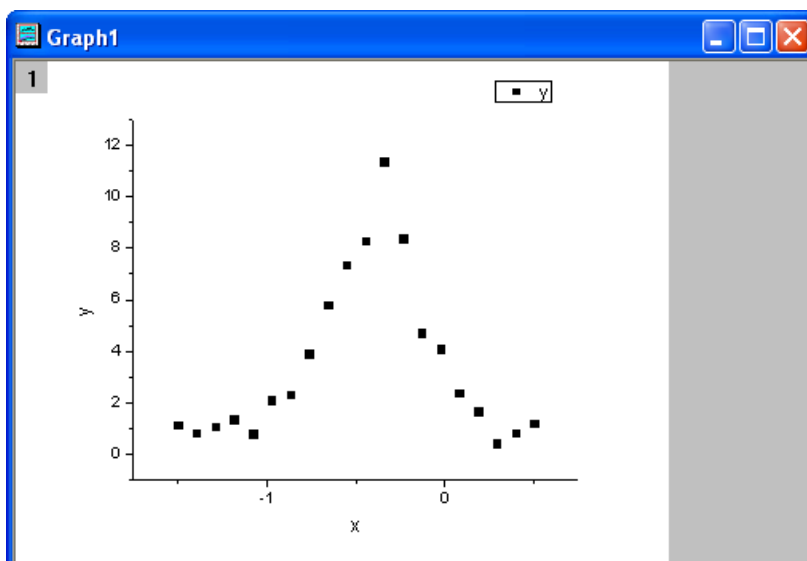
よって、有理多項フィット関数の初期パラメータを推定するのは、線形係数として **a, b, c, d, e** を持つ、複数の線形回帰の問題に変形します。つまり、次のような式になります。

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & -x_1y_1 & -x_1^2y_1 \\ 1 & x_2 & x_2^2 & -x_2y_2 & -x_2^2y_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_N & x_N^2 & -x_Ny_N & -x_N^2y_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix}$$

Origin は複数線形回帰のための関数 `ocmath_複数線形回帰` を OriginC から提供しており、初期化コードで呼び出すことができます。

データのインポート

1. 新規ワークブックを作成します。
2. [サンプルデータ](#) の内容をワークブックにコピーします。
3. 列 B を選択し、メニューから **作図: シンボル図: 散布図** と操作します。グラフは次のようになります。




フィット関数の定義と初期化パラメータ

フィット関数は、フィット関数ビルダーツールを使用して定義できます。

1. メニューから、ツール:フィット関数ビルダーを選択します。
2. フィット関数ビルダーダイアログの処理のゴールページで進むのボタンをクリックします。
3. 関数名と関数形式のページでは関数カテゴリーの選択/新規名称のドロップダウンリストから **User Defined** を選択します。次に関数名のエリアに `rationalfunc` と入力し、関数形式で算術式を選びます。進むボタンをクリックします。
4. 変数とパラメータのページでは、パラメータエリアに `a, b, c, d, e` を入力します。進むボタンをクリックします。
5. 式形式の関数ページで、以下のスクリプトを関数内容編集ボックスに入力します。

```
(a+b*x+c*x^2) / (1+d*x+e*x^2)
```

評価ボタンをクリックすると、 $x=1$ の時に $y=1$ であると示しているの、数式は正しいことを示しています。進むボタンをクリックします。

6. パラメータ初期化ルーチンページでは、初期化コードボックスの右側にある、コードビルダを開くボタンをクリックします。フィットパラメータを [algorithm](#) の記述に沿って初期化します。

```
UINT nOSizeN = x_data.GetSize(); //ポイントの数
UINT nVSizeM = 5; //パラメータの数

matrix mX(nOSizeN, 5);

//独立変数のデータポイントのための行列を作成する
vector vCa(nOSizeN), vCb, vCc, vCd, vCe;
vCa = 1;
mX.SetColumn( vCa, 0 );
vCb = x_data;
mX.SetColumn( vCb, 1 );
vCc = x_data^2;
mX.SetColumn( vCc, 2 );
vCd = -x_data*y_data;
mX.SetColumn( vCd, 3 );
vCe = -x_data^2*y_data;
mX.SetColumn( vCe, 4 );

//複数の線形回帰オプション
LROptions stLROptions;
stLROptions.UseReducedChiSq = 1;
stLROptions.FixIntercept = 1; //交点を 0 に固定 FitParameter
stFitParameters[ 6 ]; // nVSizeM+1 となるはず
UINT nFitSize = nVSizeM + 1;
```

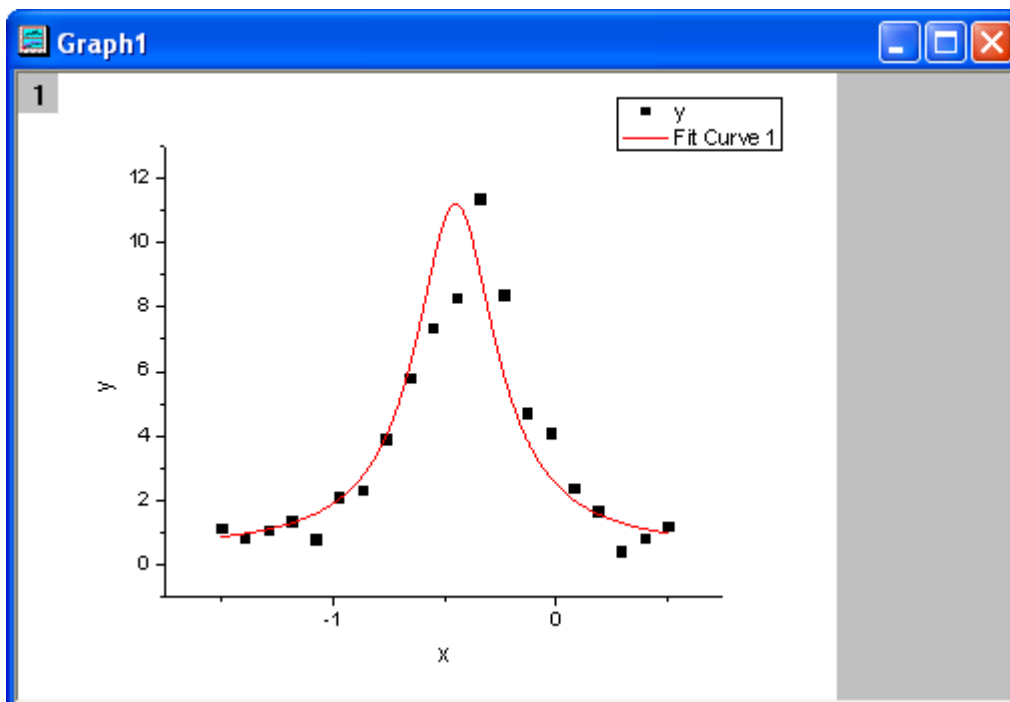
```
int nRet = ocmath_multiple_linear_regression(mX, nOSizeN, nVSizeM,
y_data,
    NULL, 0, &stLROptions, stFitParameters, nFitSize );

if( nRet == STATS_NO_ERROR )
{
    a = stFitParameters[1].Value;
    b = stFitParameters[2].Value;
    c = stFitParameters[3].Value;
    d = stFitParameters[4].Value;
    e = stFitParameters[5].Value;
}
```

コンパイルボタンをクリックしてファイルをコンパイルします。**NLSF に戻る**ボタンをクリックします。**完了**をクリックして、**フィット関数ビルダー**ダイアログを閉じます。

曲線をフィットする

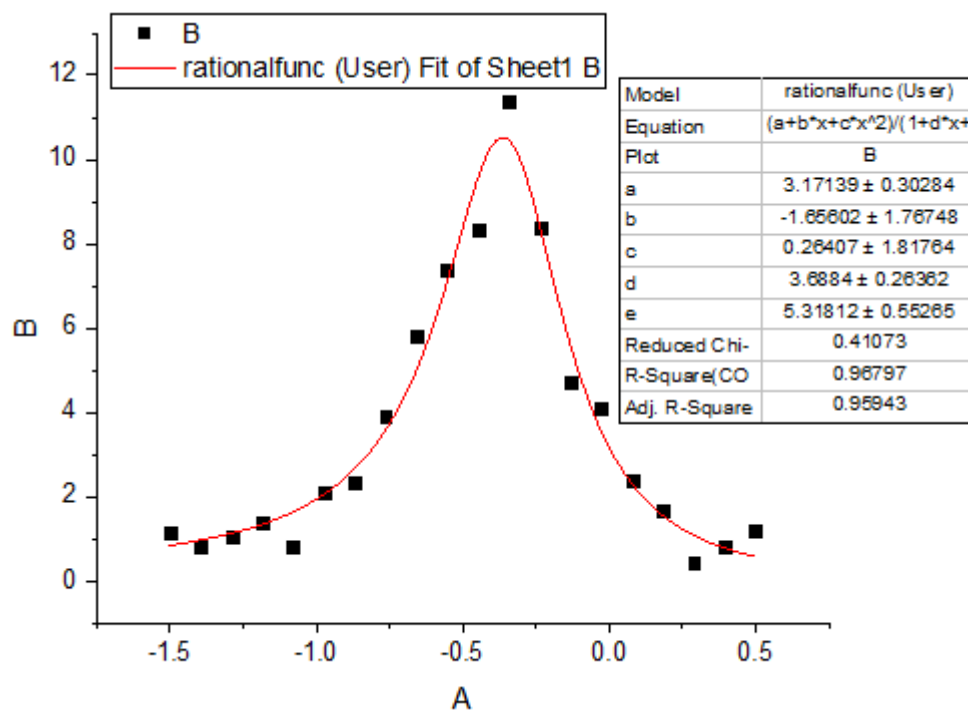
1. **解析:フィット:非線形曲線フィット**をメニューから選択します。**NLFit** ダイアログで、**設定:関数選択**を選び、**カテゴリ**ドロップダウンリストから **User Defined** を選びます。そして**関数**ドロップダウンリストでは **rationalfunc** を選びます。
2. **パラメータ**タブをクリックします。**パラメータ**タブを開くと、初期化コードから初期化パラメータが計算されてダイアログにあらかじめ入力されます。そして、初期パラメータ用のフィット関数は次のようになります。初期化コードから算出された初期パラメータはとても良いようです。



3. **フィット**ボタンをクリックし、フィットを行います。

フィット結果

フィット曲線は次のようになります。



フィットパラメータは以下の通りです。

パラメータ	値	標準誤差
a	3.17139	0.30284
b	-1.65602	1.76748
c	0.26407	1.81764
d	3.6884	0.26362
e	5.31812	0.55265

サンプルデータ

x	y
-1.5	1.13173
-1.39474	0.8262
-1.28947	1.06999
-1.18421	1.37155
-1.07895	0.79569
-0.97368	2.11346
-0.86842	2.32006
-0.76316	3.9205
-0.65789	5.81904
-0.55263	7.38037
-0.44737	8.31272
-0.34211	11.39718
-0.23684	8.39808
-0.13158	4.7305
-0.02632	4.11105
0.07895	2.39105
0.18421	1.65394
0.28947	0.42953
0.39474	0.83337
0.5	1.18758

Note この方法を使って、他の有理多項フィット関数のパラメータも初期化できます。



複数ピークによる表面フィット

Origin には、複数の表面フィット関数があり、3D フィットに対応しています。表面フィット関数は非線形曲線フィットの関数と似ています。

表面フィットは OriginPro でのみ利用できます。

必要な Origin のバージョン: OriginPro 9.0 SR0 以降

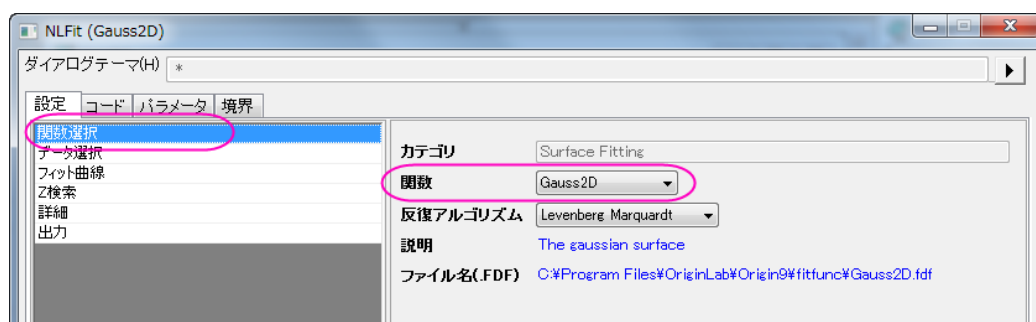
学習する項目

- 行列データで表面フィットを行う
- 複数のピークがある表面をフィットさせる

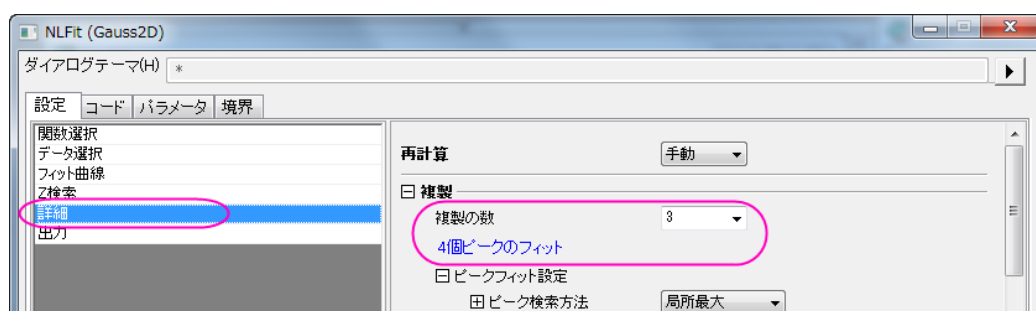
ステップ

このチュートリアルは、**Tutorial Data.opj** (<Origin EXE Folder>\Samples\Tutorial Data.opj)にある **Surface Fitting (Pro Only)** フォルダについてご説明いたします。

1. 行列シートがアクティブな状態でメインメニューから**解析**をクリックし、**非線形行列フィット**を選び NLFit ダイアログを開きます。(あるいは行列を3D 曲面図か等高線図として作図した後に**非線形表面フィット**を選んで同じダイアログを開けます。)
2. **関数選択**のページでは**関数**ドロップダウンリストから **Gauss2D** を選びます。



3. **詳細**をクリックし、**複製の数**を **3** に設定し、**ピークの向き**を正にします。



4. **フィット**をクリックして複数ピークフィットを行います。そしてフィット結果があるレポートワークシートが生成されます。

複数変数による非線形フィット

サマリー

Origin は複数の独立変数および従属変数を持つフィット関数のサポートをしています。非線形フィット関数の場合、複数の変数をセミコロンで分けて定義することができます。グローバルフィットは 1 度に1つの関数でしかフィットを行えないので、これはその制限を突破する良い手立てとなります。

Origin は複数の独立・従属変数を持った 3 つのビルトイン関数とともにお手元に届けられます。これらの関数は複数変数カテゴリから選ぶことができ、これは 2 種類の関数を合わせた複合関数になります。GaussianLorentz 関数は Gaussian と Lorentz 関数の組み合わせで、 y_0 と x_c の値を共有しています。

$$y_1 = y_0 + \frac{A_1}{w_1 \sqrt{\pi/2}} e^{-2 \frac{(x-x_c)^2}{w_1^2}}$$

$$y_2 = y_0 + \frac{2A_2}{\pi} \frac{w_2}{4(x-x_c)^2 + w_2^2}$$

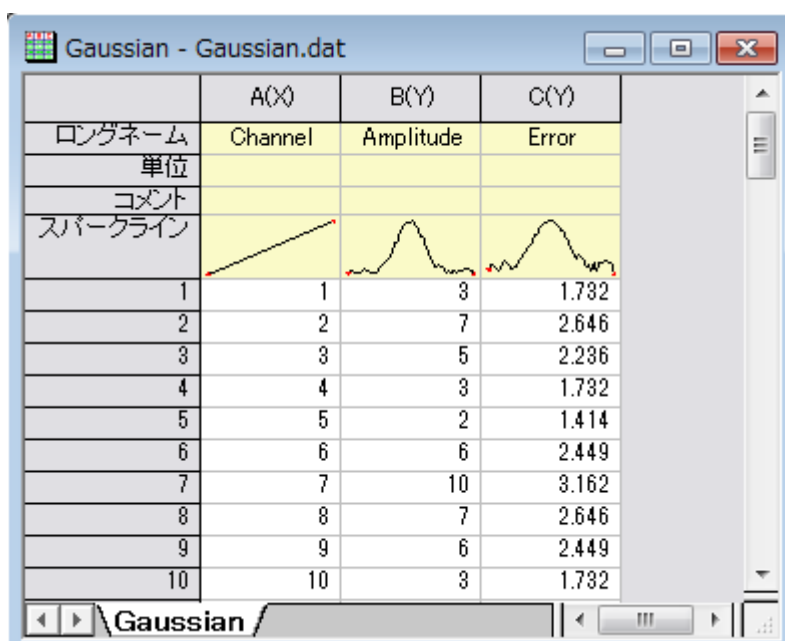
このチュートリアルでは、このような複数変数関数でフィットを実行する方法を示します。

学習する項目

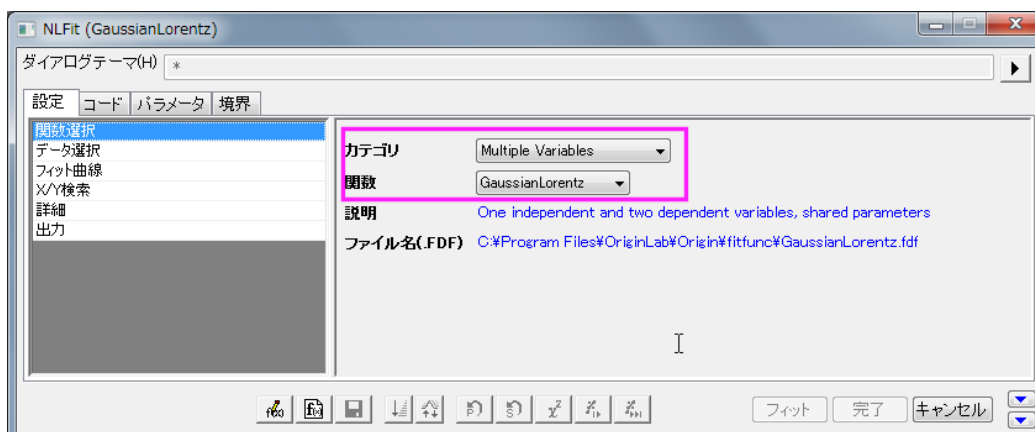
- 非線形複数変数フィットを使い、2 つの関数で曲線をフィットする
- フィット変数にデータを割り当てる

ステップ

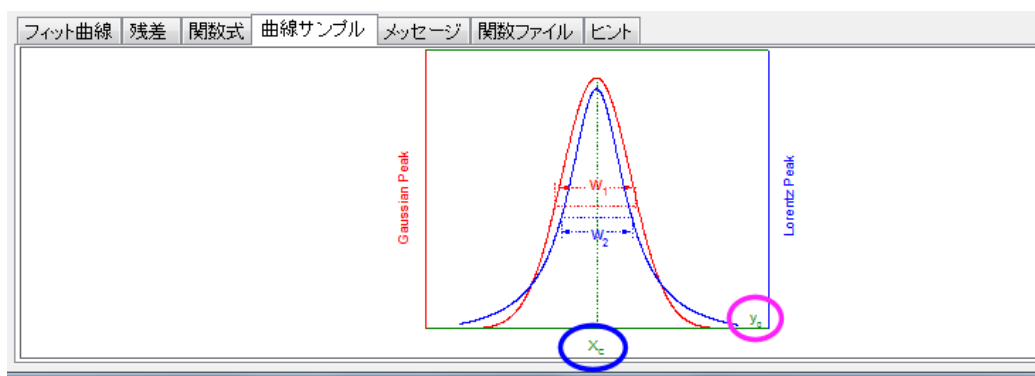
1. 新しいプロジェクトを開くか、新しいワークブックを作成し、`\samples\curve fitting\Gaussian.dat` を開きます。



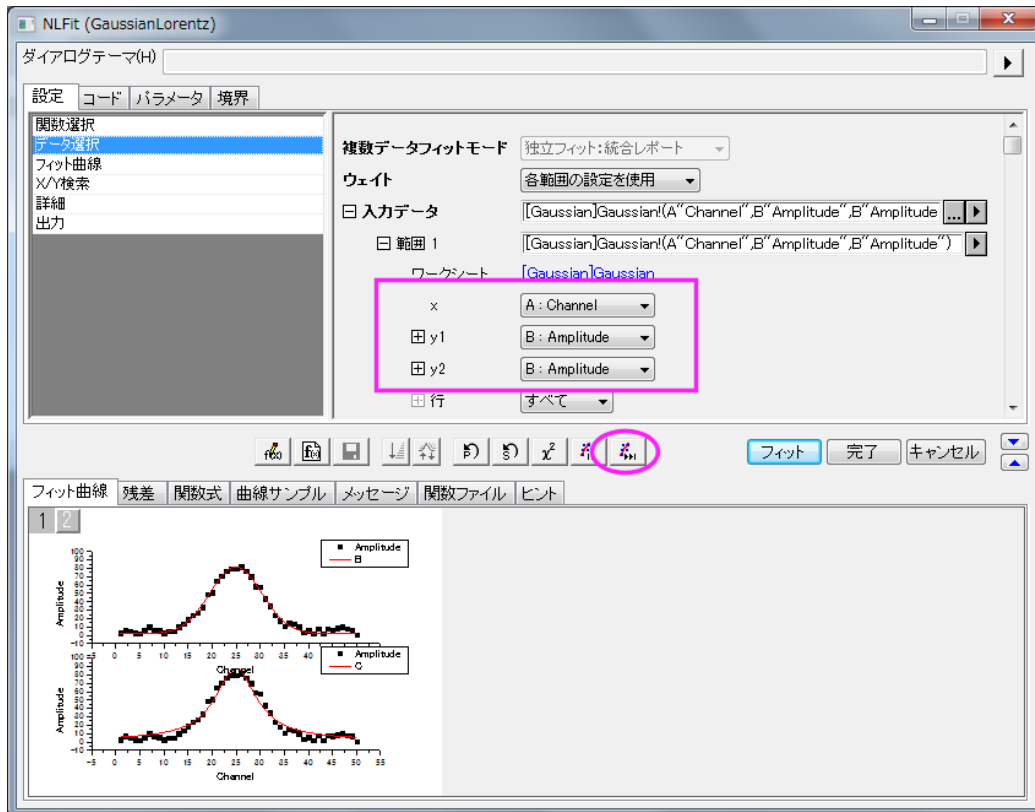
- 列 A と列 B を選択します。メインメニュー内で**解析**をクリックし、**フィット**を指した後に**非線形曲線フィット**をクリックします。
- NLfit ダイアログの左側パネルで**関数選択**を選びます。右側パネルで **Multiple Variables** をカテゴリのドロップダウンメニューから選びます。関数のドロップダウンメニューで **GaussianLorentz** を選びます。



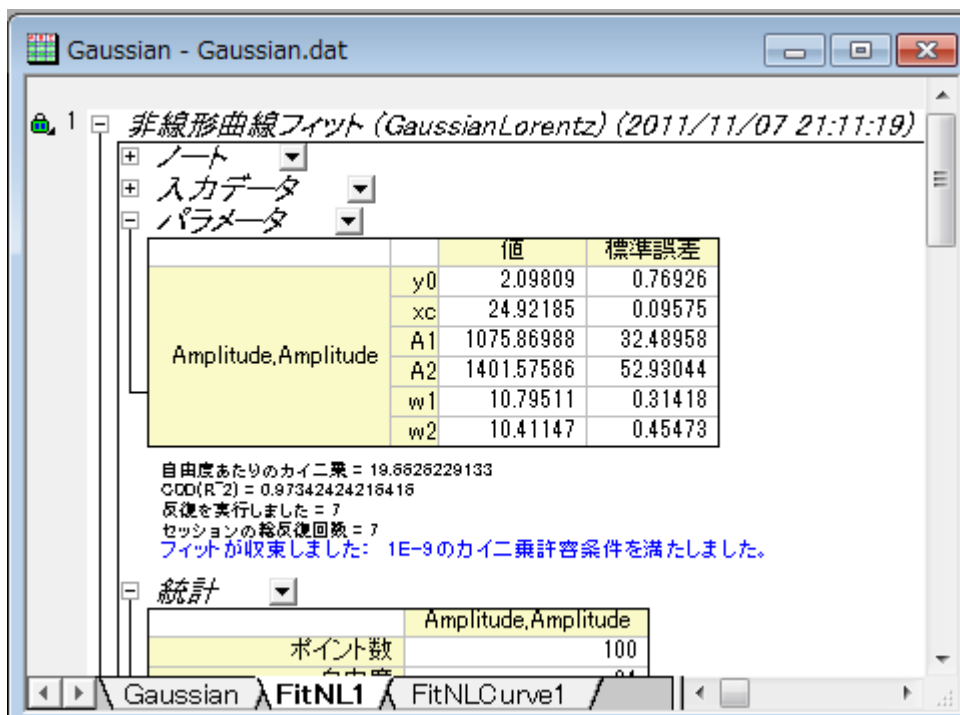
下段パネルにある曲線サンプルタブからわかるようにこの関数式は同じパラメータ y_0 と x_c を共有しています。



- NLfit ダイアログの左側パネルで**データ選択**を選びます。右側パネルで**範囲**ノードを展開し、フィット変数にデータを割り当てます。この例では列 B を y_1 と y_2 の両方として割り当てることでどちらの関数式も同じデータセットを使用するように設定しています。



5. 収束までフィットをクリックしてから、OKをクリックします。結果シートで、Gaussian と Lorentz 関数をオフセットとピークの中心を共有している状態で、パラメータ A と w の比較を行いましょう。





組み込み関数の派生パラメータを修正する

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 派生パラメータを追加](#)
- [4 派生パラメータを削除](#)

サマリー

派生パラメータは、フィットパラメータを使って計算される追加のパラメータです。組み込み関数またはユーザ定義関数に対して自分自身の派生パラメータを定義することができます。

定義した派生パラメータはフィッティングの過程では使用されず、フィッティングセッションの最後で算出されます。

学習する項目

- フィット関数オーガナイザを使って派生パラメータを組み込みフィッティング関数に追加する
- フィット関数オーガナイザを使って、組み込み関数の派生パラメータを削除する

派生パラメータを追加する

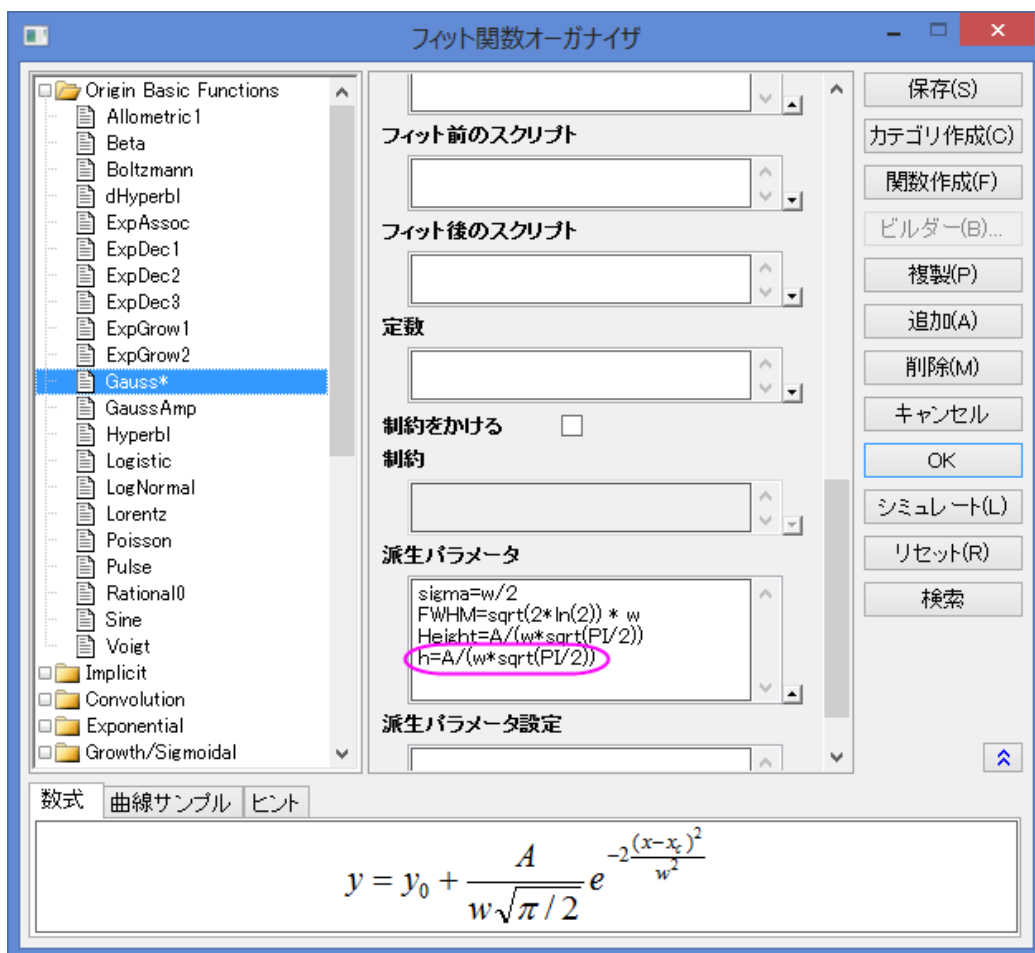
組込のガウス関数は、次の式でピーク部分をフィットします。

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

このとき、次式で計算できるピークの高さを調べるものとします。

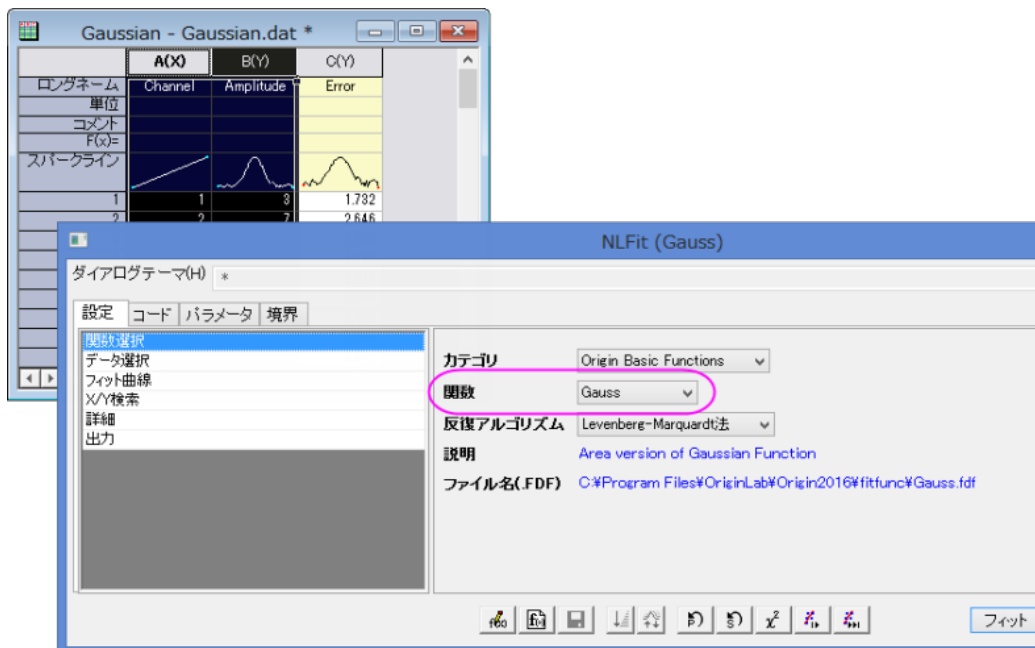
$$h = \frac{A}{w\sqrt{\pi/2}}$$

1. メニューからツール: **フィット関数オーガナイザ**を選択します。ダイアログの左側パネルで **Origin Basic Funcions: Gauss** を選択します。
2. **派生パラメータ**のセクションで次の式を入力します。 $h=A/(w*\text{sqrt}(\pi/2))$

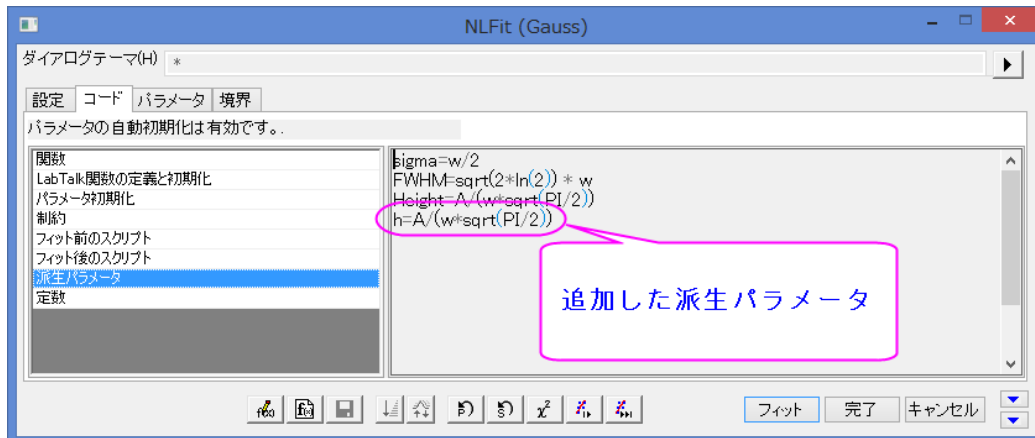
**Note:**

- 各派生パラメータは別々の行で定義する必要があります。
- 派生パラメータは、他の派生パラメータから計算できません。

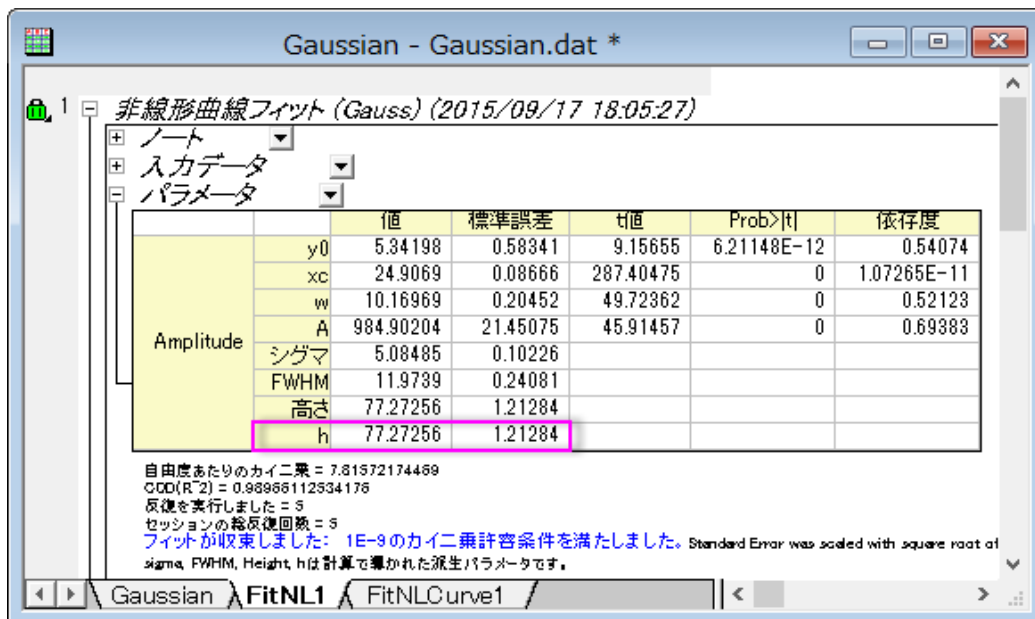
3. **保存**をクリックしてから **OK** ボタンをクリックします。
4. 新しいワークブックを作成し、**データ:ファイルからインポート:単一 ASCII ファイルツール**を使ってデータファイル `\samples\curve fitting\Gaussian.dat` をインポートします。
5. A、B 列を選択しメニューから**解析:フィット:非線形曲線フィット**を選択して、**NL Fit** ダイアログを開き、関数ドロップダウンリストから **Gauss** を選択します。



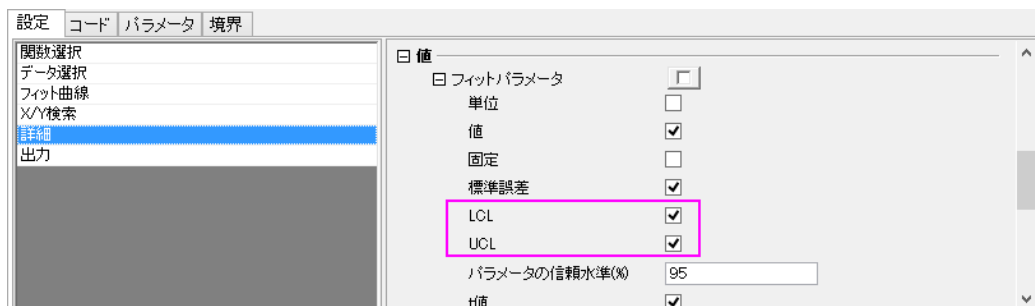
6. コードタブを開いて左側のパネルにある派生パラメータをクリックします。派生パラメータが右側のパネルにリストされます。



7. フィットボタンをクリックし、レポートシートを生成します。フィッティングののち、Origin は高さを計算し、フィット結果ワークシートのパラメータ表に結果を出力します。



8. 派生パラメーターの信頼区間を取得したい場合は、緑色のカギマークをクリックしてパラメータを変更を選択し、NLFit ダイアログに戻ります。設定タブの詳細で、右パネルの値ブランチを広げ、フィットパラメータ欄の LCL と UCL のチェックボックスにチェックを入れます。フィットボタンをクリックして再計算します。



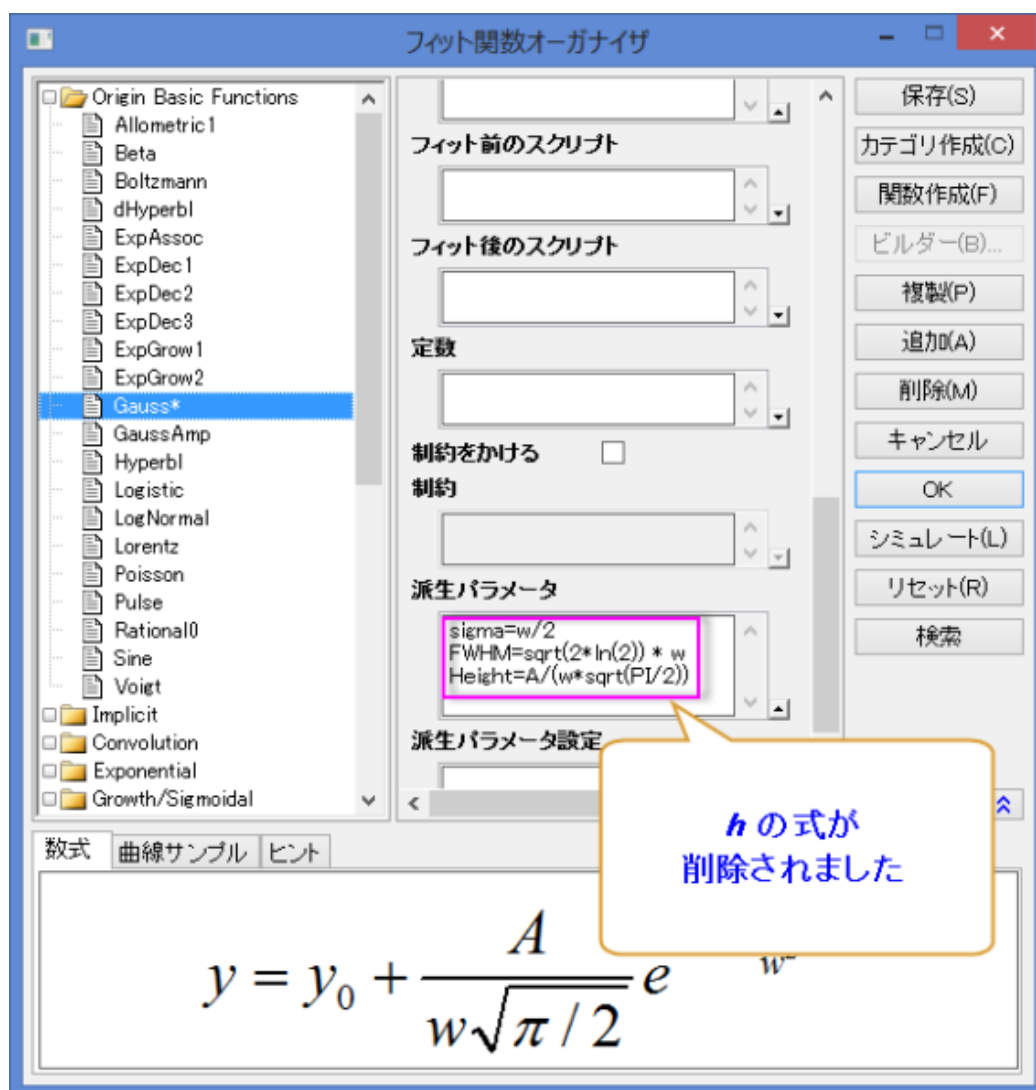
9. 次のように、信頼区間の 95% LCL と 95% UCL がパラメーター、派生パラメーターの両方に対して計算されます。

	値	標準誤差	t値	Prob> t	95% LCL	95% UCL	依存度
y0	5.34198	0.58341	9.15655	6.21148E-12	4.16764	6.51631	0.54074
xc	24.9069	0.08666	287.40475	0	24.73246	25.08134	1.07265E-11
w	10.16969	0.20452	49.72362	0	9.75801	10.58138	0.52123
A	984.90204	21.45075	45.91457	0	941.72392	1028.08016	0.69383
シグマ	5.08485	0.10226			4.879	5.29069	
FWHM	11.9739	0.24081			11.48917	12.45862	
高さ	77.27256	1.21284			74.83123	79.71389	
h	77.27256	1.21284			74.83123	79.71389	

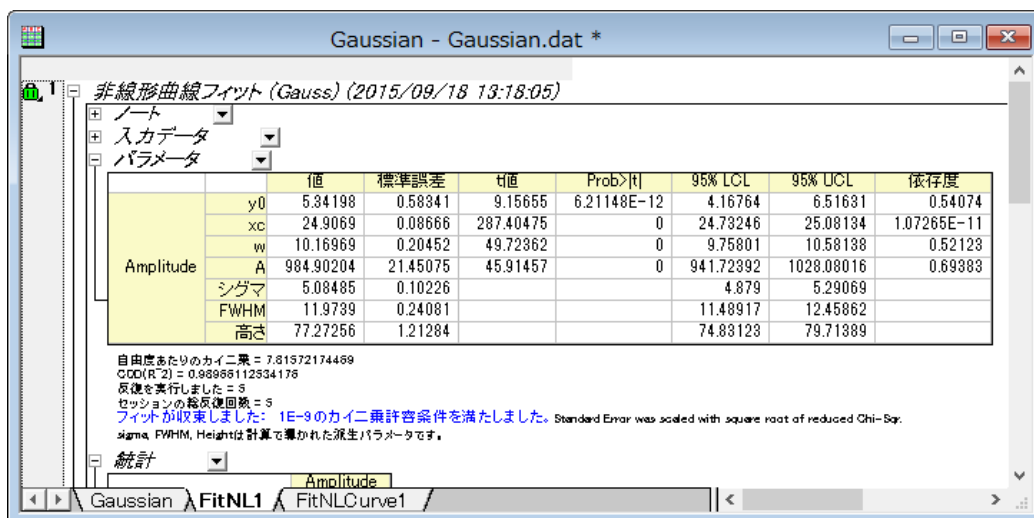
派生パラメータを削除

結果シートから派生パラメータを削除することも可能です。上述のチュートリアルの操作に続けて、以下の操作を行います。

1. メニューからツール:フィット関数オーガナイザを選択して再度ダイアログを開きます。ダイアログの左側パネルで **Origin Basic Functions: Gauss** を選択します。
2. 派生パラメータのセクションで次の式、 $h=A/(w*\sqrt{\pi/2})$ を削除します。



3. **保存**ボタンが有効になるまで、1、2秒時間がかかります。**保存**ボタンをクリックしてから、**OK**ボタンを押してダイアログを閉じます。
4. 結果シート *FitNL1* の左上にある緑の鍵のアイコンをクリックし、パラメータを変更を選択し、開いた **NLFit (Gauss)** ダイアログで、**フィット**ボタンを再度クリックします。結果表から派生パラメータ *h* が削除されます。



複数のデータセットで一つのフィットを行い、そのパラメータを使って他のデータセットのフィットを行う

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ステップ](#)
 - [3.1 フィット関数ビルダーを使用してユーザ定義関数を作成する](#)
 - [3.2 ユーザ定義関数を使用して、複数データセットをフィットする](#)

サマリー

複数のデータセットがあり、それをユーザ定義関数でフィットする時に、パラメータ初期コードを使わずにフィットしたいこともあるでしょう。効率を上げるために、1つのデータセットをフィットした後に他のデータセットにパラメータを当てはめる事ができます。

必要な Origin のバージョン: Origin 8.6 以降

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- フィット関数ビルダーでフィット関数を作成する
- 独立フィットを行う

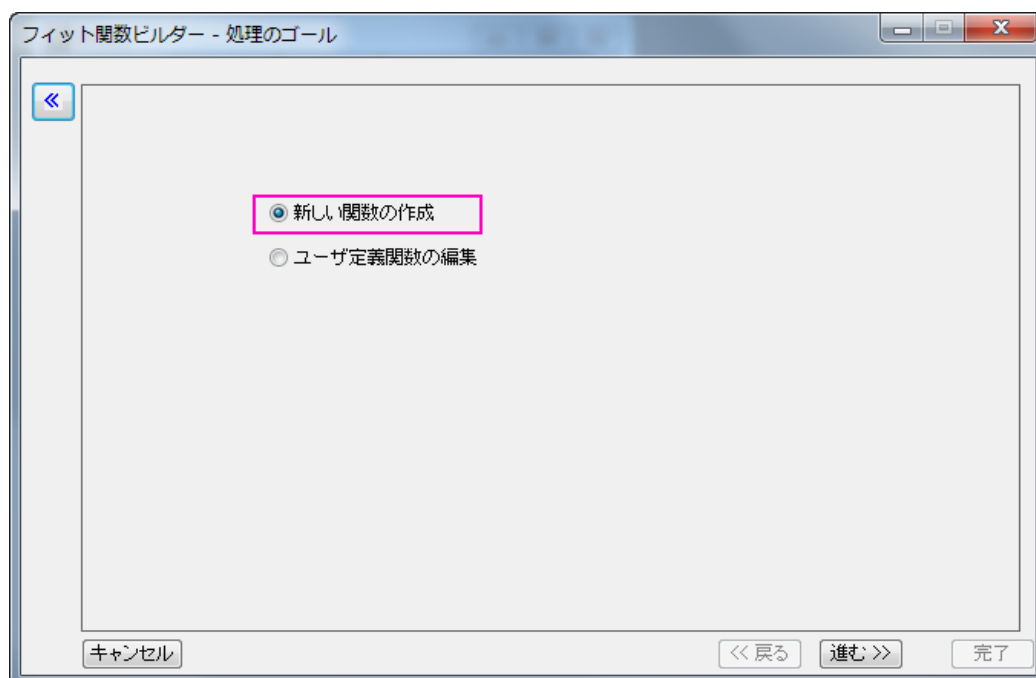
- 複数のデータセットのうち1つのフィットを1回反復と完全反復する
- 1つのデータセットのパラメータを他のデータセットに適用する

ステップ

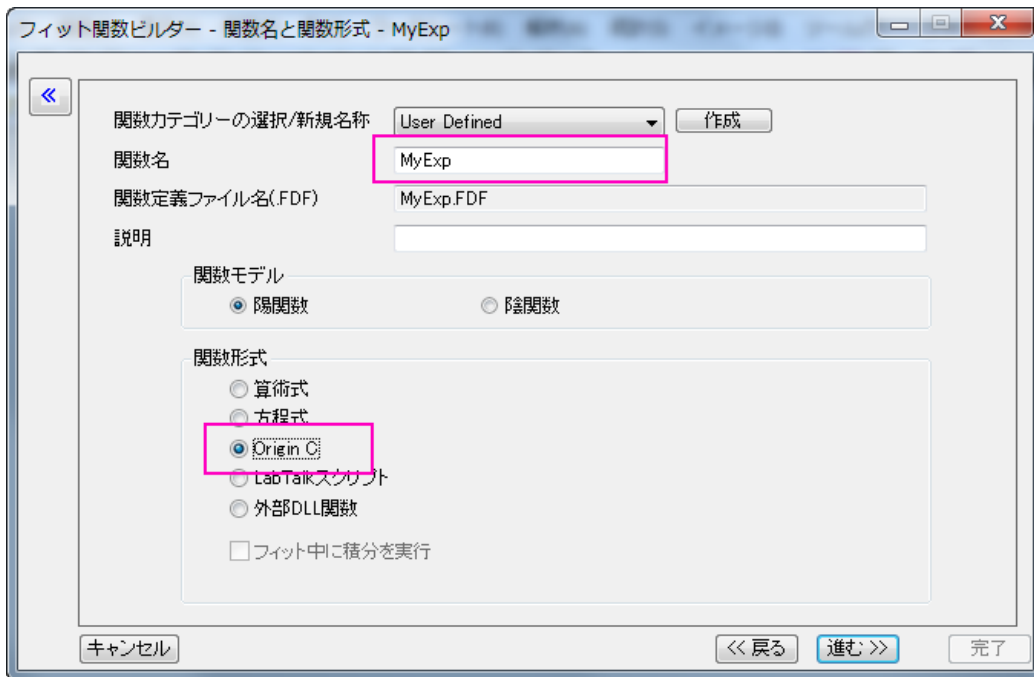
フィット関数ビルダーを使用してユーザ定義関数を作成する

フィット関数ビルダーは、ユーザ定義関数の作成と編集に使用します。以下のセクションでは、このツールを使用してフィット関数 *MyExp* を作成します。

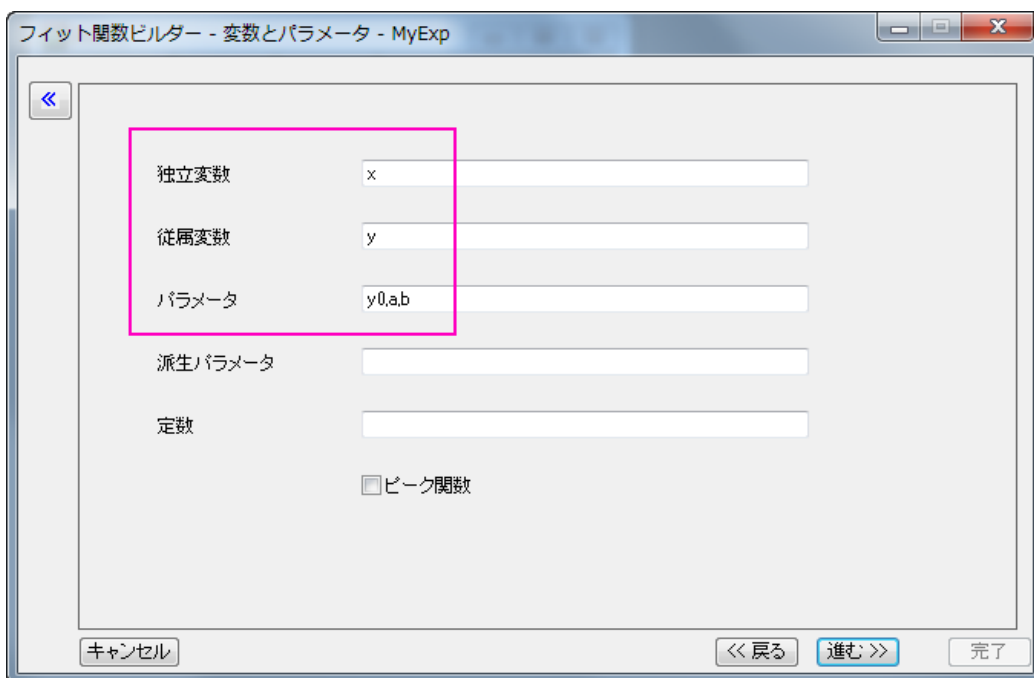
1. メインメニューからツール: **フィット関数ビルダー** を選択、もしくは **F8** キーを押して**フィット関数ビルダー**ダイアログを開きます。**新しい関数の作成**のラジオボタンを選択します。



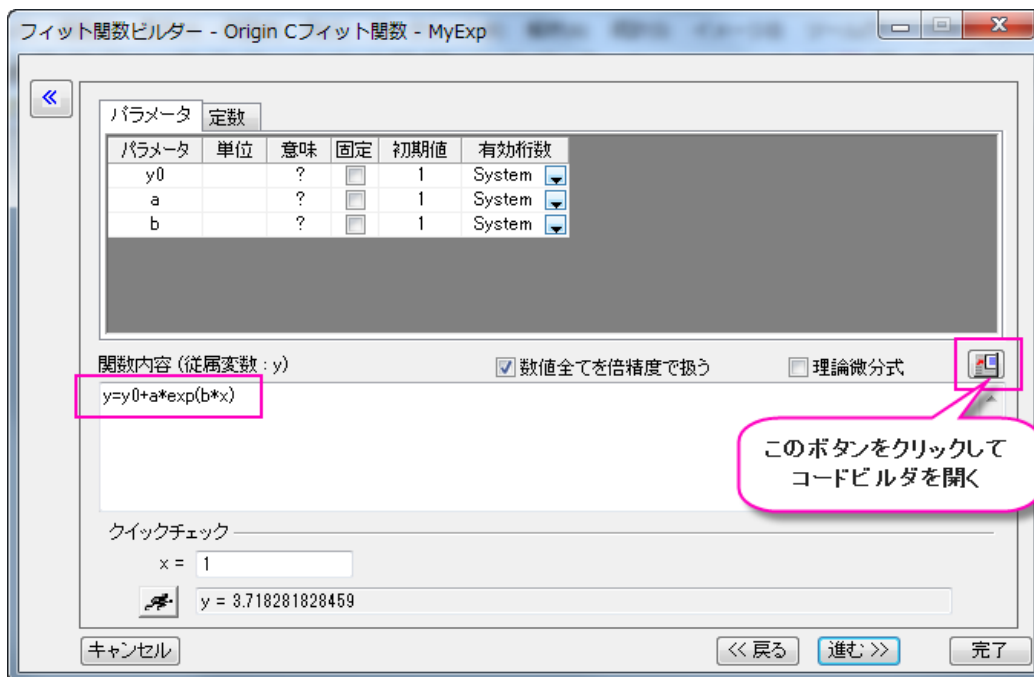
2. **進む**をクリックし、**関数名と関数形式**ページに移動します。**関数名**ボックスに *MyExp* と入力し、**関数形式**の中で **OriginC** のラジオボタンを選択します。



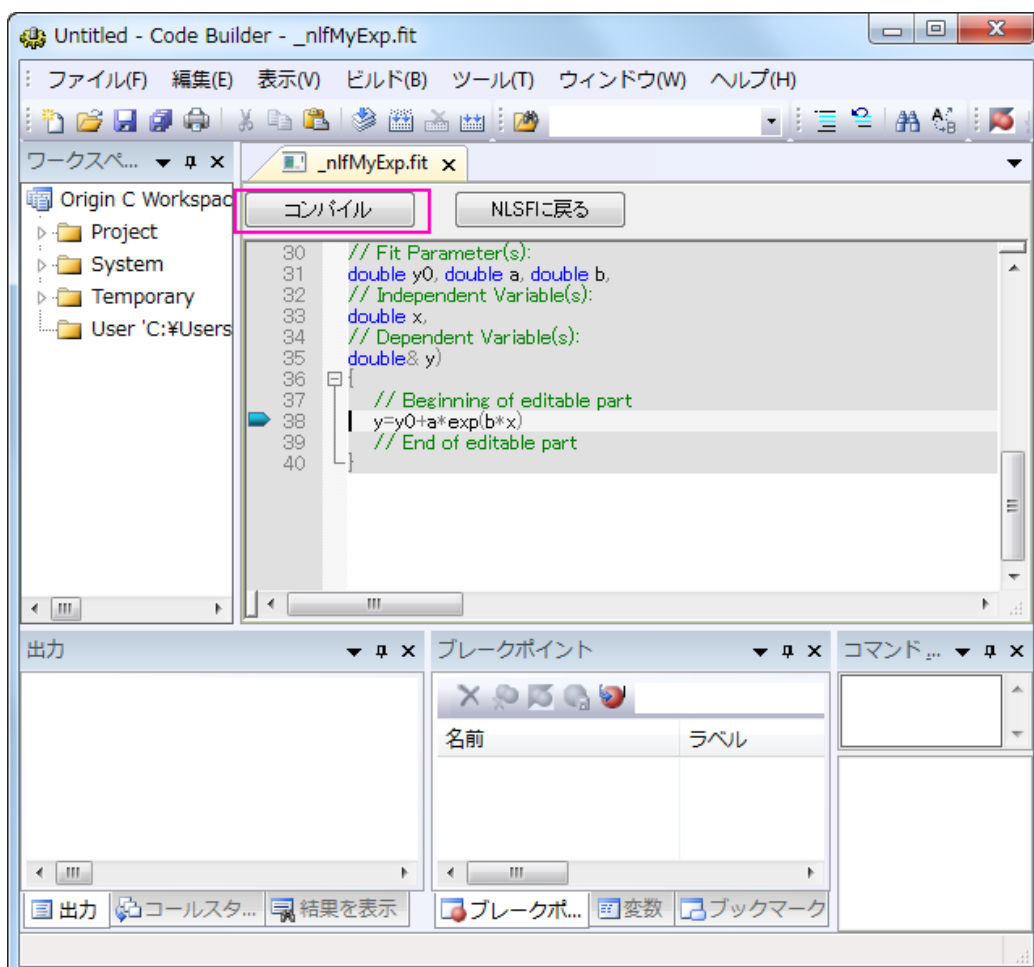
- 進むをクリックし、変数とパラメータページに移動します。次のスクリーンショットのように変数とパラメータを入力します。



- 進むをクリックし、OriginC フィット関数ページに移動します。関数内容のボックスに、関数の内容 $y=y_0+a*\exp(b*x)$ を入力します。関数の正確性を確認するために、関数ボックスの隣にあるボタンをクリックして Origin コードビルダを開きます。



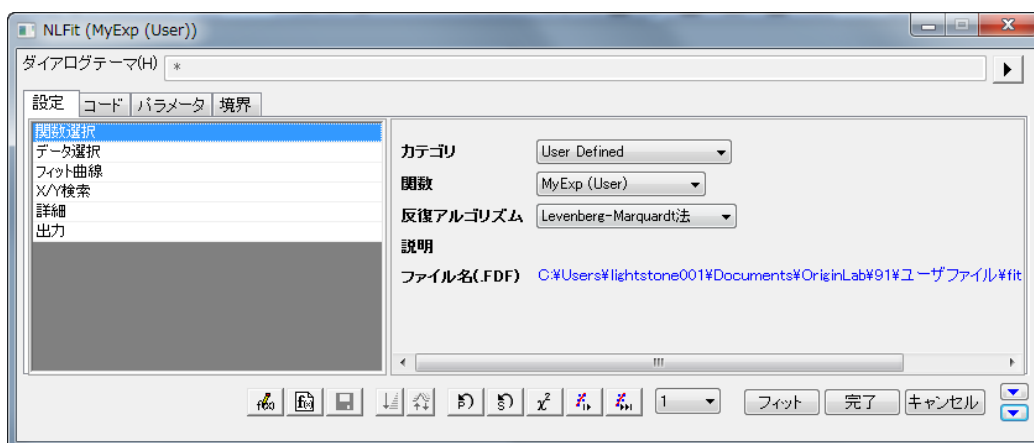
開いたコードビルダで、コンパイルボタンをクリックして関数をコンパイルします。コンパイル完了のメッセージが表示されるので、ダイアログに戻るボタンをクリックしてフィット関数ビルダーに戻ります。



- 完了ボタンをクリックして関数 *MyExp* の定義を終了します。

ユーザ定義関数を使用して、複数データセットをフィットする

- Origin のワークシートに `\Samples\Curve Fitting\Exponential Decay.dat` をインポートします。
- 全ての列を選択し、メニューから**解析: フィット: 非線形曲線フィット**と操作し、**NLFit** ダイアログを開きます。
- 設定**タブの**関数選択**ページで、定義した関数を選択します。



- パラメータ**タブに切り替え、1 番目のデータセットで y_0 , a , b の初期値として、**値**列に 80, 100, -5 をそれぞれ入力します。独立フィットのドロップダウンリストから 1 を選択し、そのまま 1 番目のデータセットを収束まで反復します。
- パラメータ値が計算され、フィットの結果がこのダイアログの左角にヒントとして表示されます。
- 他のデータセットのパラメータを初期化するには 1 つ目のデータセットのパラメータを他のデータセットに当てはめます。値を右クリックし、**"値"の全体をすべてのデータセットに適用する**をコンテキストメニューから選びます。
- フィット**ボタンをクリックして、全てのデータセットのフィットを実行します。



3 変数の陰関数でフィット

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 サンプルとステップ](#)
 - [3.1 データをインポートする](#)
 - [3.2 関数を定義する](#)
 - [3.3 曲線をフィットする](#)
 - [3.4 フィット結果](#)
 - [3.5 フィット曲線](#)

サマリー

このチュートリアルでは変数の陰関数を定義する方法と、フィットデータを使って陰関数フィットを行います。
必要な Origin のバージョン: OriginPro 9.0 SR0 以降


学習する項目

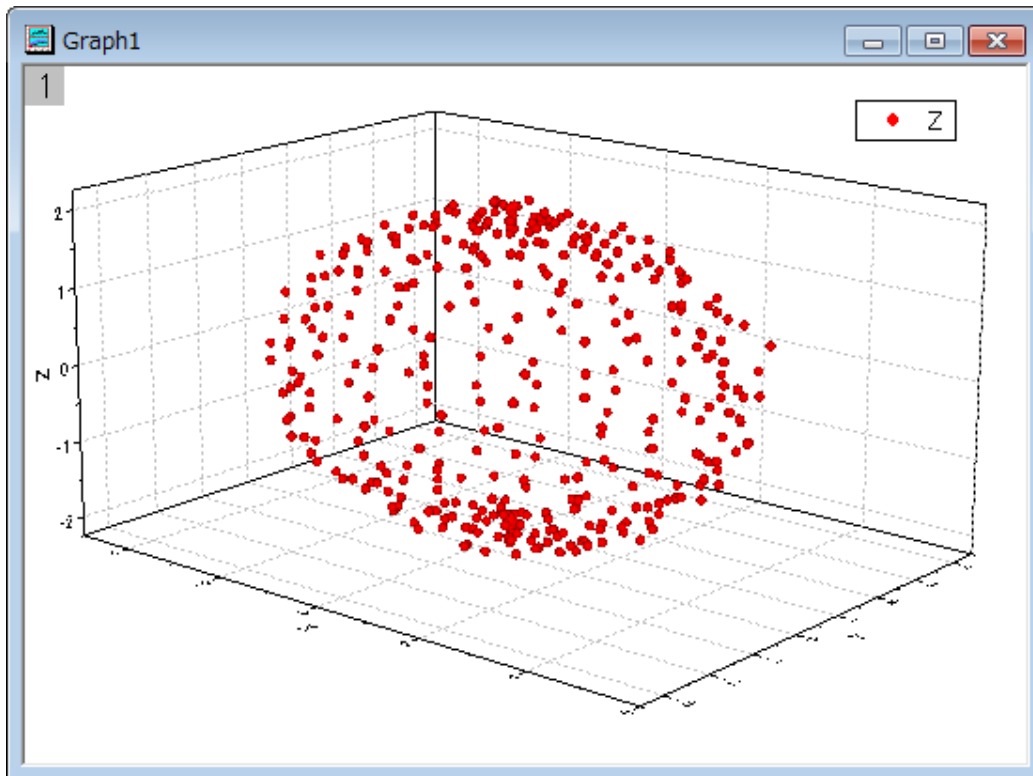
このチュートリアルでは、以下の項目について解説します:

1. 陰フィット関数を定義する
2. 3つの独立変数から陰関数のフィッティングを行う
3. フィット曲面を作図する

サンプルとステップ

データのインポート

1. **単一 ASCII ファイルインポート** ボタン  をクリックし、「ASCII」ダイアログボックスを開きます。**Samples\Curve Fitting** フォルダに移動し、**Ellipsoid.dat** ファイルを開きます。
2. 列 C を選択し、その上で右クリックすると開くコンテキストメニューから**列 XY 属性の設定: Z 値** を選択します。Origin のメニューから**作図: 3D: 3D 散布図** を選択します。グラフ上でダブルクリックします。**作図の詳細** ダイアログの左側パネルで **Layer1** を選択し、**軸タブ** を開いてから **X、Y、Z の長さ** を順番に 100, 75, 50 と設定し OK ボタンをクリックします。**3D 回転** ツールバーの **フレームに合わせる** ボタンをクリックします。グラフは次のようになります。



フィット関数を定義する

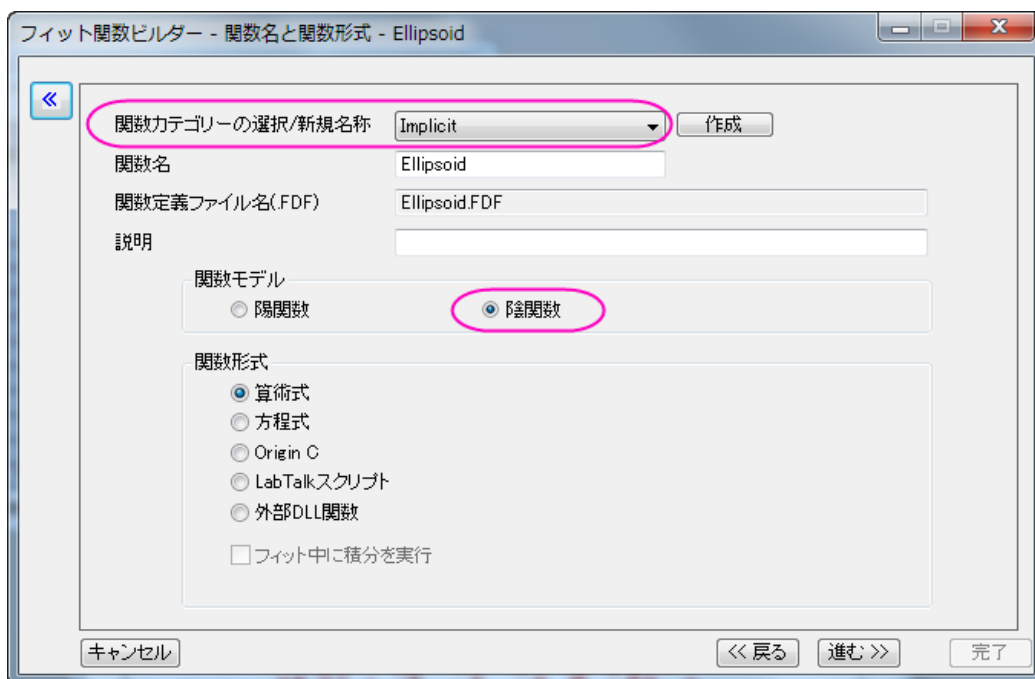
このグラフは楕円体でフィットする事ができます。この関数は次のように表現できます。

$$\frac{(x - x_0)^2}{a^2} + \frac{(y - y_0)^2}{b^2} + \frac{(z - z_0)^2}{c^2} = 1$$

ここで、 (x_0, y_0, z_0) は楕円体の中心位置、 a, b, c は各方向の形の半分の長さ、 x, y, z はフィットデータの3つの独立変数です。

フィット関数は、**フィット関数ビルダー**ツールを使用して定義できます。

1. ツール:**フィット関数ビルダー**をメニューから選択します。
2. **フィット関数ビルダー**ダイアログの**処理の**ゴールページで**進む**のボタンをクリックします。
3. **関数名と関数形式**のページでは**関数カテゴリー**の**選択/新規名称**のドロップダウンリストから **Implicit** を選択します。
次に**関数名**のエリアに **Ellipsoid** と入力し、**関数モデル**では**陰関数グループ**を選択します。**進む**をクリックします。



Note: 陰関数は **Implicit** カテゴリ内で定義する必要があります。

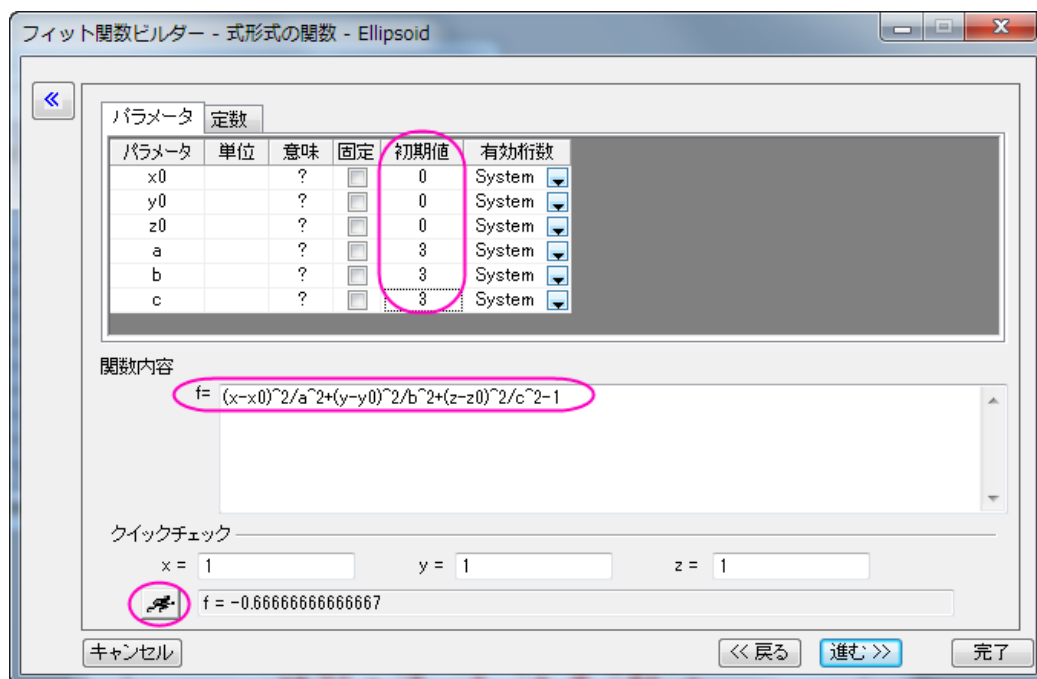
4. **変数とパラメータ**ページでは、変数エリアに **x, y, z** と入力し、**パラメータ**エリアには **x0, y0, z0, a, b, c** と入力します。**進む**をクリックします。
5. **式形式の関数**ページで、以下のスクリプトを**関数内容編集ボックス**に入力します。

```
(x-x0)^2/a^2+(y-y0)^2/b^2+(z-z0)^2/c^2-1
```

6. 陰関数 $f_1(x_i, p_i) = f_2(x_i, p_i)$ 内では、 $x_i (i=1,2,..)$ は独立変数、 $p_i (i=1,2,..)$ はパラメータとなり、Origin 内では **f** を**推定値**として $f = f_1(x_i, p_i) - f_2(x_i, p_i)$ のように定義されています。**パラメータ**タブで初期パラメータを以下のように設定します。

```
x0=0 y0=0 z0=0 a=3 b=3 c=3
```

7. **クイックチェック**グループで**評価**ボタンをクリックして $x=1, y=1, z=1$ が $f=-0.667$ になる事を確認します。



進むボタンをクリックし、もう一度進むボタンをクリックします。

8. 境界条件と一般線形制約ページでは a, b, c の下限値を次のように設定します。

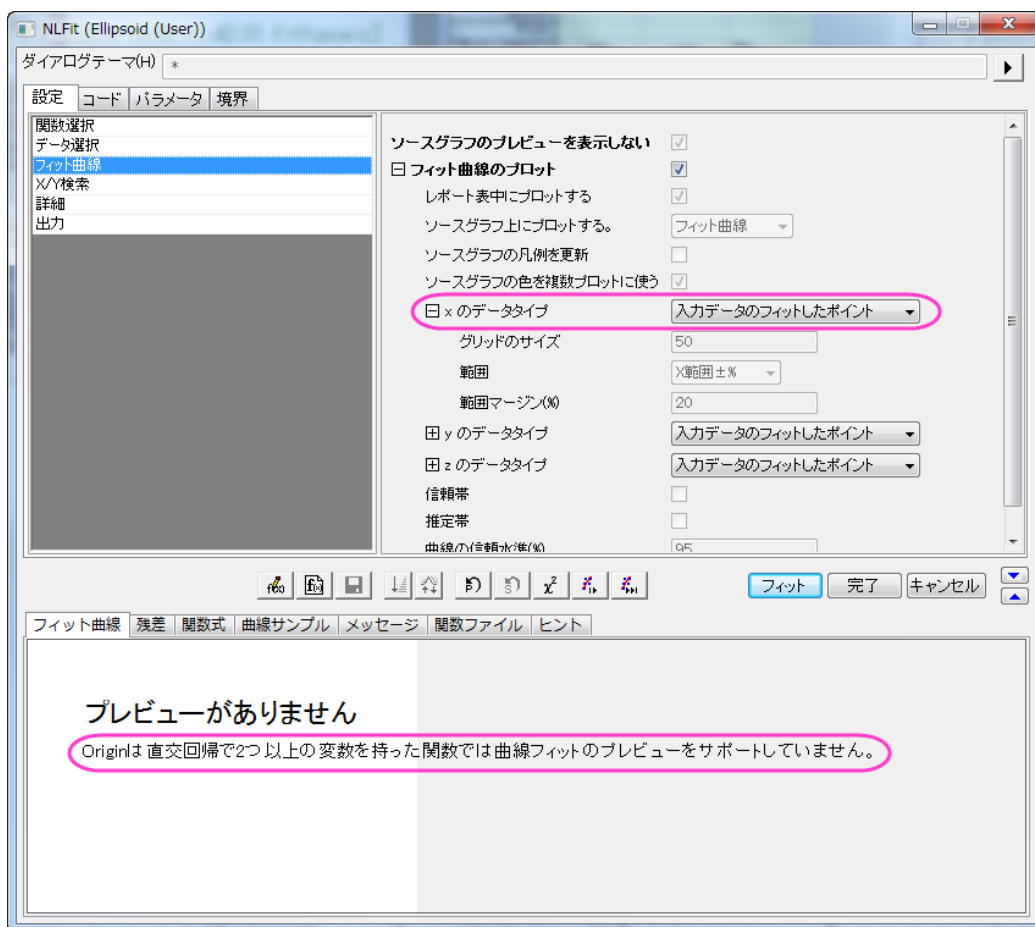
$$a > 0 \quad b > 0 \quad c > 0$$

9. 完了ボタンをクリックして、ダイアログを閉じます。

Note 陰関数がユーザファイルフォルダに保存されたという内容がメッセージログに表示されます。

曲線をフィットする

- Origin は 2 つ以上の独立変数を持つ陰関数のフィットはワークブックからの入力データのみをサポートしています。グラフからはサポートしていません。つまり、フィットする前にフィットデータが入ったアクティブなワークブックを作成する必要があります。ワークブックをアクティブにしてから **解析: フィット: 非線形陰関数カーブフィット** をメニューから選択します。NLFit ダイアログで、**設定: 関数選択**と選択して、関数ドロップダウンリストから **Ellipsoid** 関数を選択します。
- データ選択**ページに移動し、**入力データ: 範囲 1**を開き、「A:X, B:Y, C:Z」として割り当てます。**設定**パネルの下部にエラーメッセージが出力されます。エラーメッセージの情報に従い、**フィット曲線**ページを開き、X のデータタイプのドロップダウンリストで**入力データのフィットしたポイント**に変更します。**y のデータタイプ**と **z** は自動的に変更されます。



Note Origin は 2 つ以上の独立変数を持つ陰関数でのフィットでは、NLFit ダイアログ内でのフィット曲線プレビューをサポートしていません。

3. フィット関数ビルダで初期のパラメータを知っているため、フィットボタンをクリックします。

フィット結果

フィットレポートに切り替えます。パラメータと統計値の表がレポートに表示されます。

フィットパラメータは以下の通りです。

パラメータ	値	標準誤差
x0	0.41073	0.01576
y0	0.32043	0.01352
z0	0.00147	0.00749
a	4.00325	0.02076
b	3.00097	0.01881
c	1.99972	0.00933

そして、Adj.です。補正 R 二乗が 0.99823 となっているので、このフィット結果はとても良い事を示しています。Note Origin9.0 32 ビット版と Origin9.0 64 ビット版でフィットした結果は若干異なりますが、64 ビット版の方がより正確な結果を示しています。

FitODRCurve1 ワークシートでは、最初の 3 列はフィットしたポイントの XYY 座標を示しています。

Note 陰関数のフィッティングでは、x、y、z は全て独立変数であり、フィットが反復されるごとに値の調整が行われます。

フィット曲面

Origin9.0SR1 では、2 つ以上独立変数による陰関数のフィッティングではフィット曲面がレポートに表示されません。このような場合は、以下のように 3D パラメトリック関数グラフを利用して楕円グラフにフィットさせることができます。

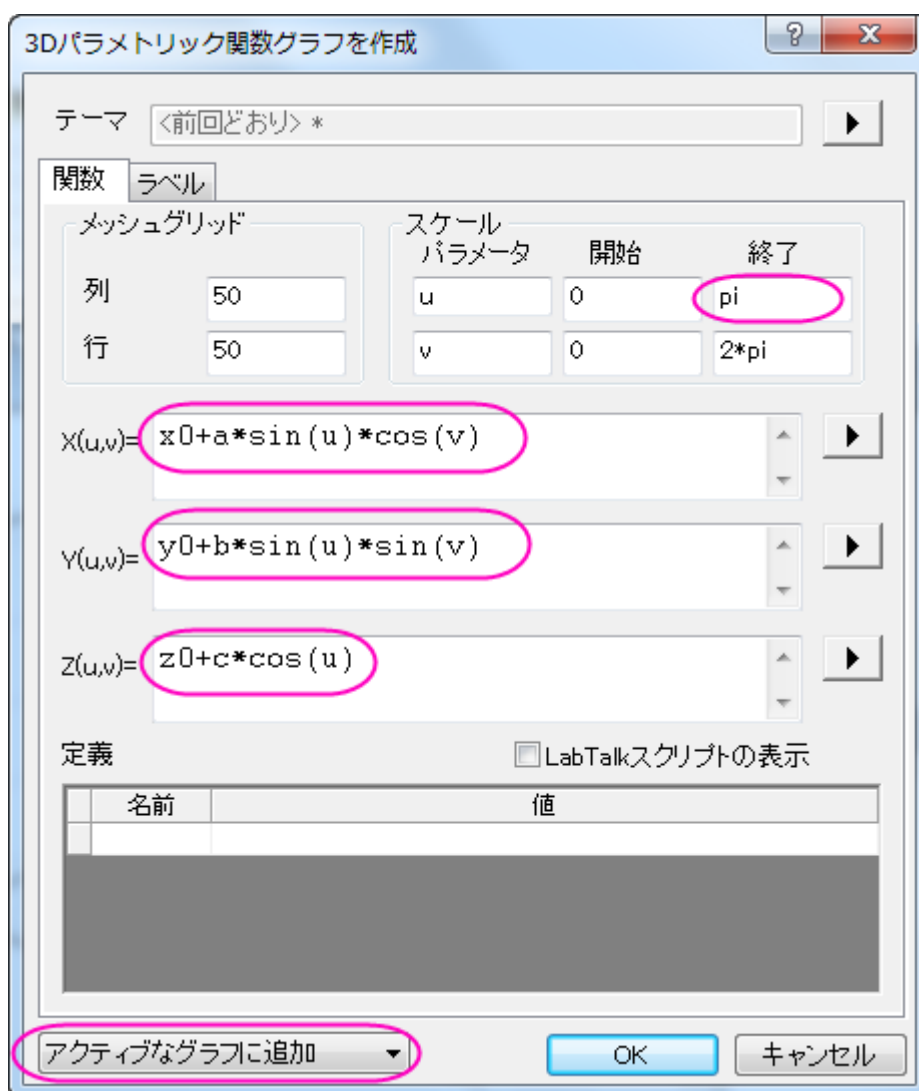
1. フィットレポートを選択して、スクリプトウィンドウで以下の LabTalk スクリプトを実行して、フィットされたパラメータ変数を入手します。

```
getnlr tr:=tt;  
x0=tt.x0;  
y0=tt.y0;  
z0=tt.z0;  
a=tt.a;  
b=tt.b;  
c=tt.c;
```

2. 変数 **x0**、**y0**、**z0**、**a**、**b**、**c** は以下の方法で利用することもできます。
3. **Graph 1** をアクティブにします。メニューから**ファイル:新規作成:関数グラフ:3D パラメトリック関数グラフ**を選択します。**3D パラメトリック関数グラフを作成する**ダイアログで、**u**を 0 から π に、**v**を 0 から $2*\pi$ に設定します。**X**、**Y**、**Z**を以下のように定義します。

```
X(u,v)=x0+a*sin(u)*cos(v)  
Y(u,v)=y0+b*sin(u)*sin(v)  
Z(u,v)=z0+c*cos(u)
```

4. ダイアログ左下のドロップダウンリストで、**アクティブなグラフに追加する**を選択します。

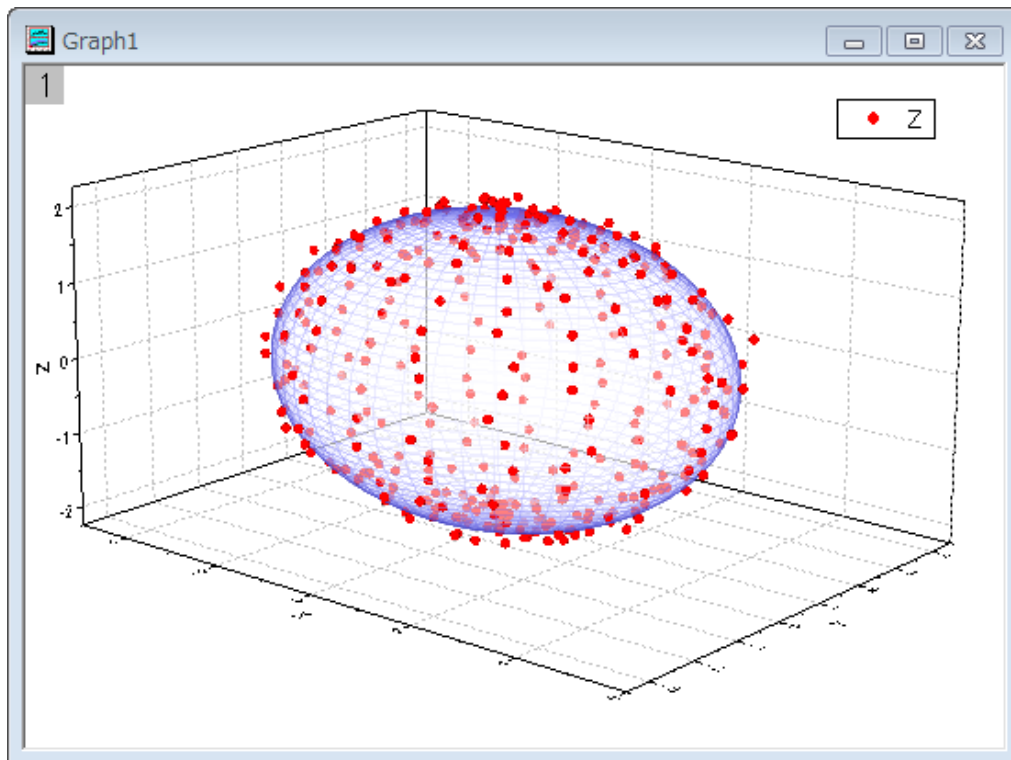


5. **OK** ボタンをクリックして、ダイアログを閉じます。**Graph 1** に 3D 楕円グラフが追加されます。
6. グラフ上でダブルクリックします。**作図の詳細**ダイアログで、以下のようにグラフをカスタマイズします。

Note Origin9.0 では、OpenGL のバージョンが 2.1 以上の場合、3D 透過に対応しています。Origin のメニューから **ツール:3D OpenGL の設定** と選択すると、ご利用いただいている PC の OpenGL バージョンを確認できます。バージョンが 2.1 よりも低い場合、3D 透過のステップを無視してステップ 3.2 に進んでください。

1. 左のパネルで **Layer 1** を選択し、**サイズ/描画スピード** タブを開き、**スピードモード**(必要に応じて **ポイントスキップ**)グループで **ワークシートデータ**、**曲線あたりの最大ポイント数**のチェックを外します。**ライティング**タブを開き、**モード**グループで **平行光源** を選択し、**光の色**グループで **環境光** に青を設定します。
2. **Layer1** のブランチで 2 つ目のプロットを選択し、**面**タブを開いてから **透明度** を 50% に変更します。**塗りつぶし**タブを開き、**表面**グループで **ひとつずつ塗りつぶす色** を白にします。**OK** ボタンをクリックして、ダイアログを閉じます。

楕円グラフにフィットしたグラフは以下のようになります。



直交距離回帰を使用した非線形曲線フィット

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 サンプルとステップ](#)

サマリー


指数データに非線形曲線フィットを実行するとき、データに含まれる独立変数と従属変数の両方のエラーを考慮する必要があります。Origin では、直交距離回帰(ODR)を使用して、陽関数でも陰関数でもフィットできます。このチュートリアルでは、X の誤差と Y の誤差のあるデータで組み込み関数と共に ODR を使用して非線形曲線フィットを実行します。

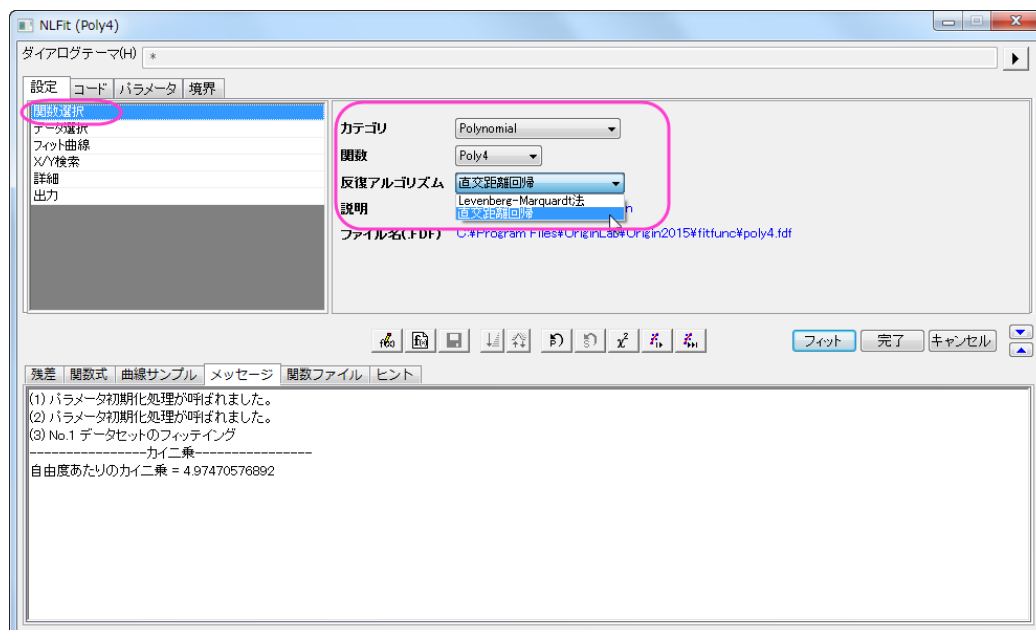
必要な Origin のバージョン: Origin 9.1 以降

学習する項目

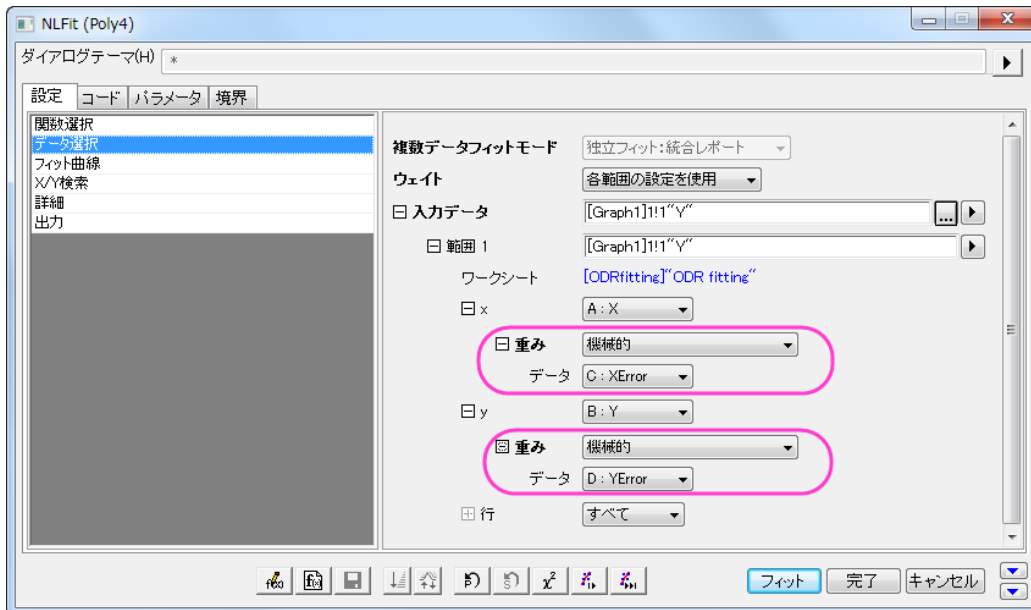
X と Y の誤差を含んだデータに直交距離回帰を使用して非線形曲線フィットを行う方法を紹介します。

サンプルとステップ

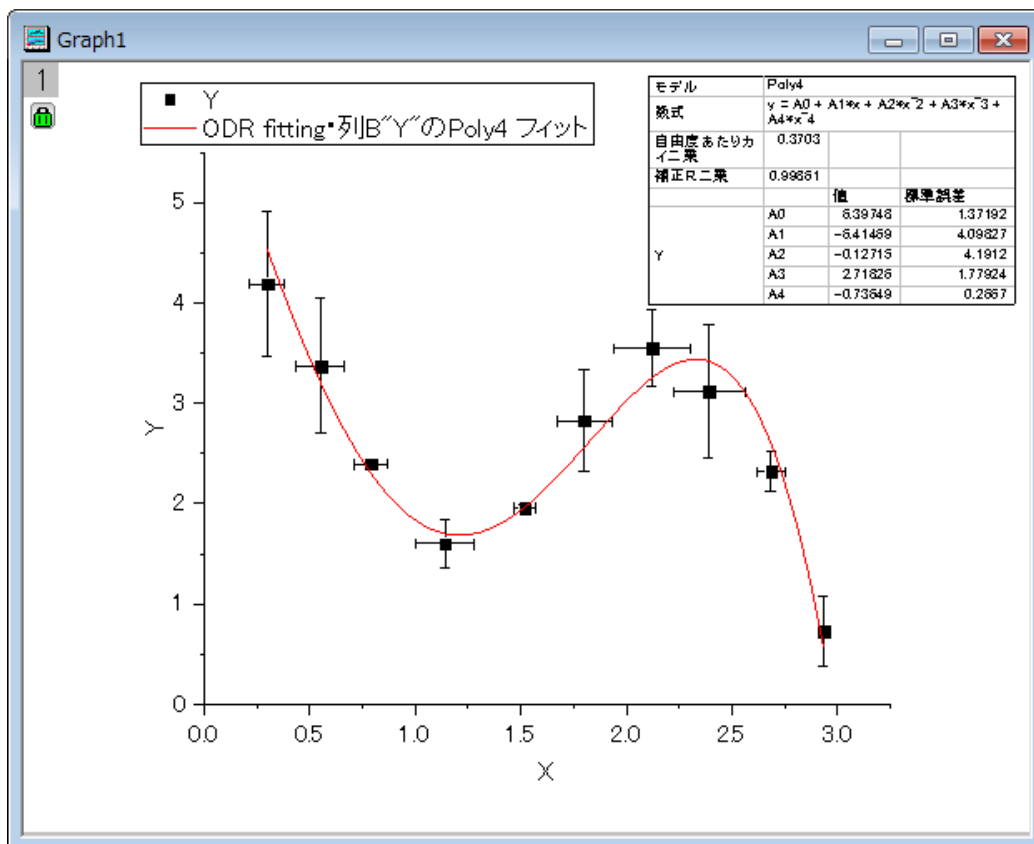
1. ワークブックを新しく作成します。
2. 単一 ASCII ファイルインポート ボタン  をクリックし、「ASCII」ダイアログボックスを開きます。\\Samples\Curve Fitting フォルダの、ODR fitting.dat ファイルを選択し、開きます。
3. ロングネームが XError となっている列を選択し、列の XY 属性の設定: X エラーバーと操作して X のエラー列にします
4. ロングネームが YError となっている列を選択し、列の XY 属性の設定: Y エラーバーと操作して Y のエラー列にします。
5. 4 つの列全てを選択し、作図: シンボル: 散布図と操作して X と Y のエラーバー付散布図を作図します。
6. 解析: フィット: 非線形曲線フィットと操作して NLFit ダイアログを開きます。
7. 関数選択項目で、カテゴリでは Polynomial、関数では Poly4、アルゴリズムでは直交距離回帰を選択します。



8. X と Y の誤差列はステップ 3 と 4 で設定したため、直交距離回帰がアルゴリズムで設定されたとき、自動的にこれらの情報が X と Y の重みとして換算され、適用されます。データ選択項目を開き、入力データのなかでそれぞれ x と y 開くと確認できます。



9. フィットボタンをクリックし、表示される確認メッセージではいいえのラジオボタンを選択して OK をクリックしてダイアログを閉じると、以下のような結果が表示されます。



ODR アルゴリズムの詳細や Levenberg Marquardt (L-M) アルゴリズムの詳細はこちらのページを参照してください。直交直線回帰を陰関数にフィットしている例としては[こちら](#)をご覧ください。

4.3. 信号処理

4.3.1. FFT と IFFT

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 FFT ROI ツール](#)
- [4 FFT](#)
- [5 IFFT](#)

サマリー

FFT(高速フーリエ変換)は、時間領域の信号を周波数領域に変換します。IFFT(逆FFT)は周波数領域から時間領域に変換します。非周期な信号のFFTは、結果の周波数スペクトルの漏れが起こることがあります。Originは、漏れを軽減するためにいくつかの窓関数をサポートしています。

学習する項目

このチュートリアルで以下のことを行います：

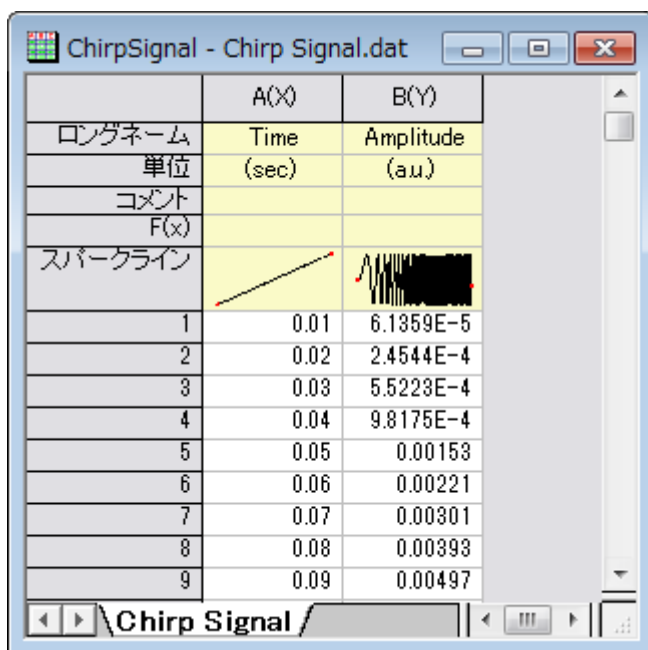
1. 異なる窓関数を使用してFFTを実行する
2. スペクトルにより元の信号を修復する
3. FFTガジェットを使用してFFTを実行する

FFT ROI ツール

FFT ROI ツールは、信号データのグラフ上に矩形を配置し、その中のデータにFFTを実行するために使用されます。このツールは、データのFFTによる効果を素早く観察するためにとても便利です。

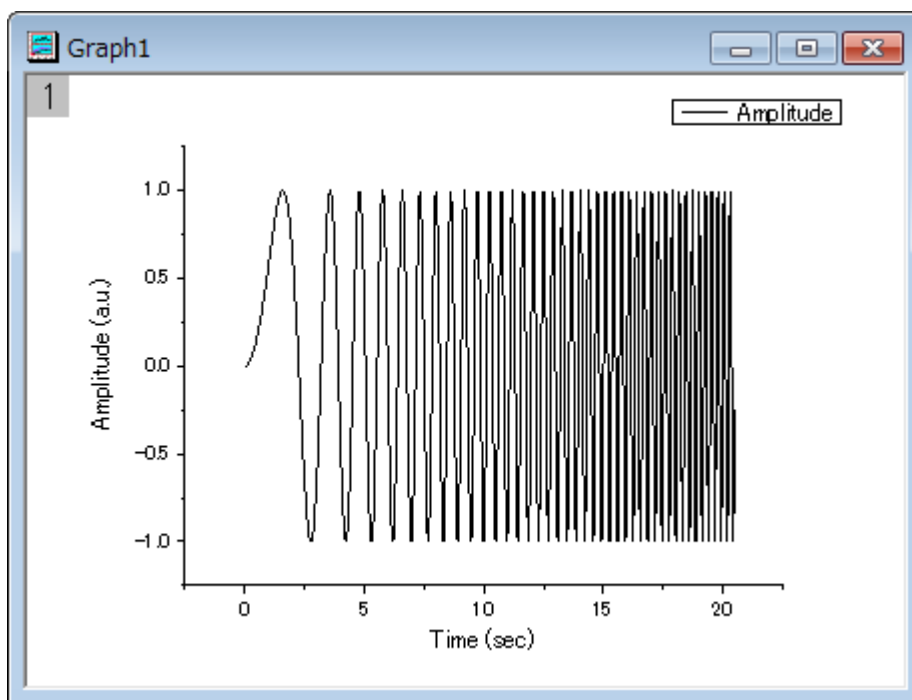
以下では、1つのデータに対してFFT ROI ツールを使用する方法を紹介します。

1. 新しいワークブックを作成し、<Origin インストールディレクトリ>\Samples\Signal Processing\Chirp Signal.dat をインポートします。

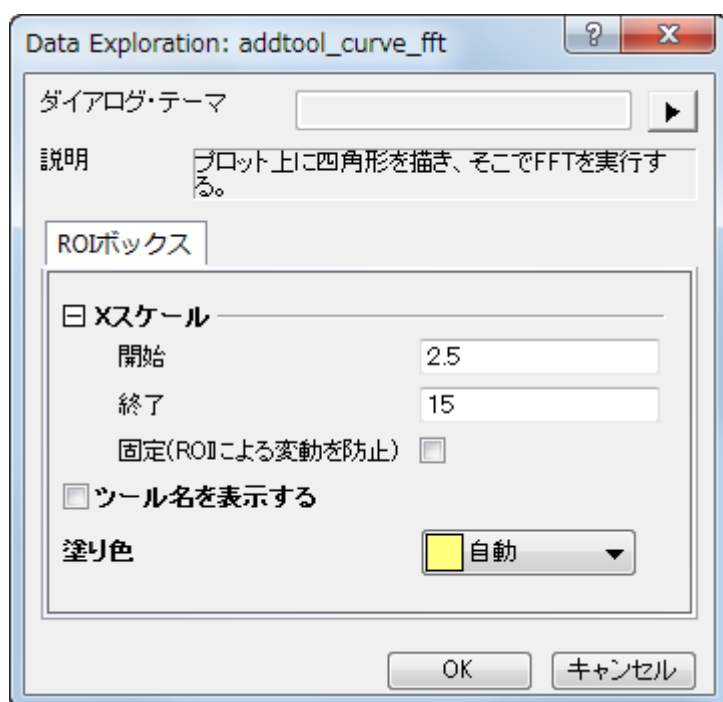


	A(X)	B(Y)
ロングネーム	Time	Amplitude
単位	(sec)	(a.u.)
コメント		
F(x)		
スパークライン		
1	0.01	6.1359E-5
2	0.02	2.4544E-4
3	0.03	5.5223E-4
4	0.04	9.8175E-4
5	0.05	0.00153
6	0.06	0.00221
7	0.07	0.00301
8	0.08	0.00393
9	0.09	0.00497

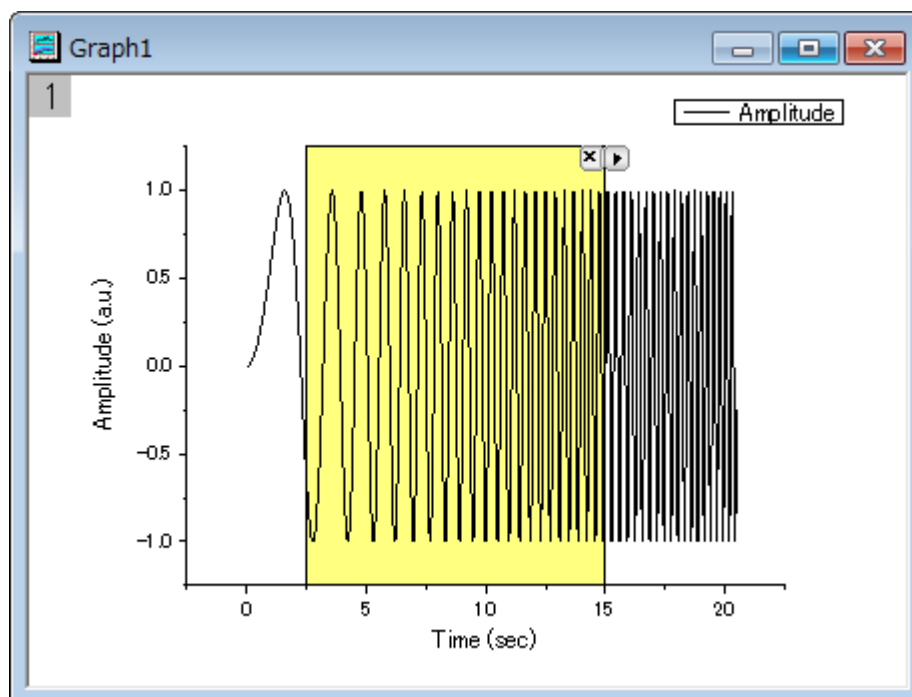
2. B 列を選択し、メニューから**作図:線図:折れ線**を選択してグラフを作図します。



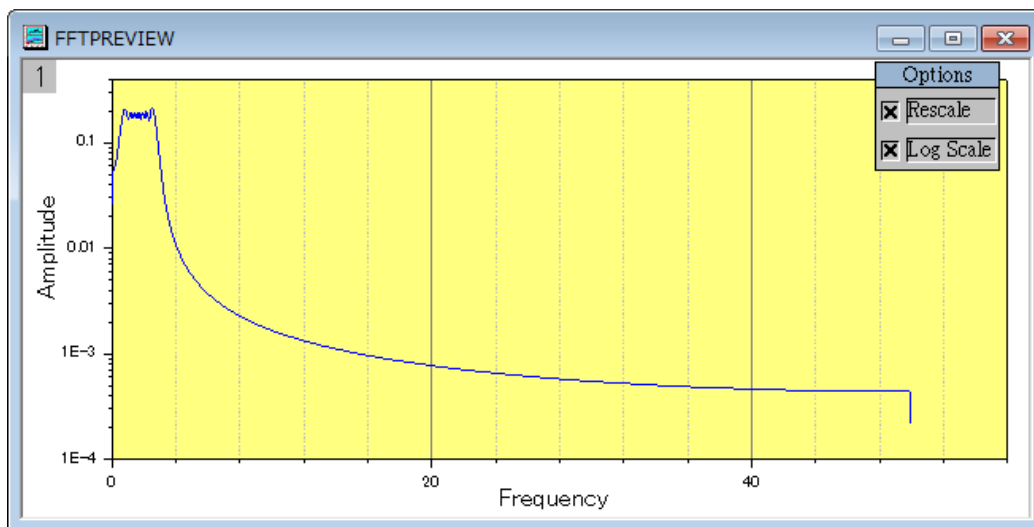
3. グラフをアクティブにして、**ガジェットメニューの FFT ROI ツール**を選択してダイアログを開きます。



4. デフォルトのまま、**OK** ボタンをクリックし、グラフに矩形(ROI)を配置します。



5. 選択されたデータにする FFT 結果をグラフ化した、**FFTPREVIEW** グラフが作成されます。

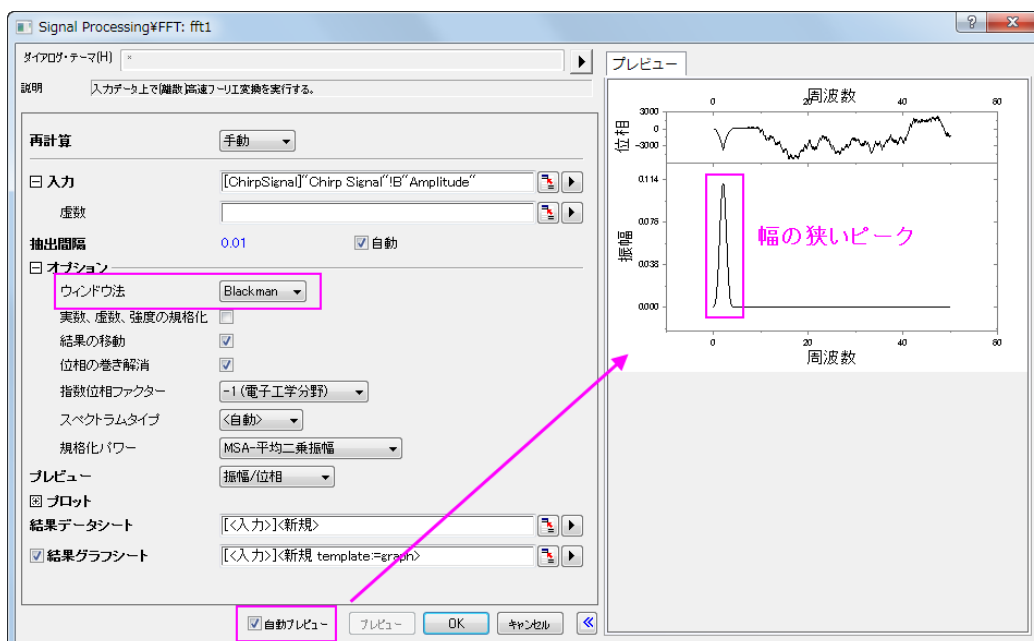


- 異なる部分を覆うために、データの矩形を左右に移動することが可能です。また、矩形の幅を変更して、カバーするデータポイント数を変えることもできます。ROIを移動したりサイズを変更すると、**FFTPREVIEW** は更新されます。

FFT

このサンプルでは、漏れを抑制するために窓関数の変更を行います。

- 上のセクションの **FFT ROI ツール** で使用したデータと同じデータを使用します。
- B 列を選択して、**解析: 信号処理: FFT: FFT** を選択し、**Signal Processing\FFT: fft1** ダイアログを開きます。
- ダイアログの **自動プレビュー** チェックボックスにチェックを付け、右パネルでプレビューできるようにします。**ウィンドウ法** を **Blackman** にし、その他の設定はデフォルトのままにします。右パネルで、振幅の鋭くて幅の狭いピークスペクトルがあることがわかります。**Blackman** ウィンドウは非常によく、漏れを抑制しています。



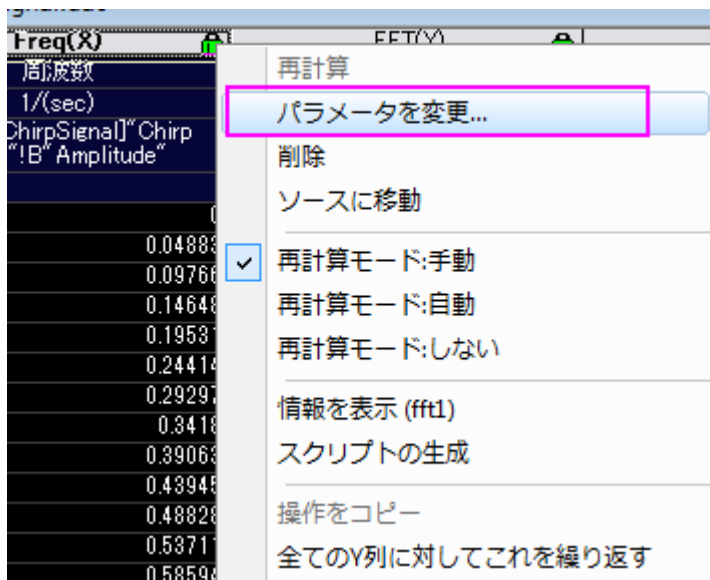
4. OK ボタンをクリックして、グラフとデータを含む結果を出力します。

ロングネーム	Freq(X)	FFT(Y)	Real(Y)	Imag(Y)
単位	周波数	複素数	実数	虚数
コメント	1/(sec)	(au)	(au)	(au)
F(x)	FFT of [ChirpSignal]"Chirp Signal"!B" Amplitude"	FFT of [ChirpSignal]"Chirp Signal"!B" Amplitude"	FFT of [ChirpSignal]"Chirp Signal"!B" Amplitude"	FFT of [ChirpSignal]"Chirp Signal"!B" Amplitude"
1	0	0.49655	0.49655	
2	0.04883	0.56803 + 0.02488i	0.56803	0.02488
3	0.09766	0.75959 - 0.05824i	0.75959	-0.05824
4	0.14648	0.9911 - 0.35805i	0.9911	-0.35805
5	0.19531	1.08758 - 0.9538i	1.08758	-0.9538
6	0.24414	0.76276 - 1.8041i	0.76276	-1.8041
7	0.29297	-0.30535 - 2.59818i	-0.30535	-2.59818
8	0.3418	-2.21063 - 2.64437i	-2.21063	-2.64437
9	0.39063	-4.35596 - 1.03696i	-4.35596	-1.03696
10	0.43945	-5.11147 + 2.59384i	-5.11147	2.59384
11	0.48828	-2.36496 + 6.82765i	-2.36496	6.82765
12	0.53711	4.30939 + 7.86383i	4.30939	7.86383
13	0.58594	10.81065 + 1.80187i	10.81065	1.80187
14	0.63477	9.09309 - 9.57551i	9.09309	-9.57551
15	0.68359	-4.50178 - 15.0493i	-4.50178	-15.0493
16	0.73242	-18.25783 - 2.85419i	-18.25783	-2.85419
17	0.78125	10.80287 + 10.62259i	10.80287	10.62259

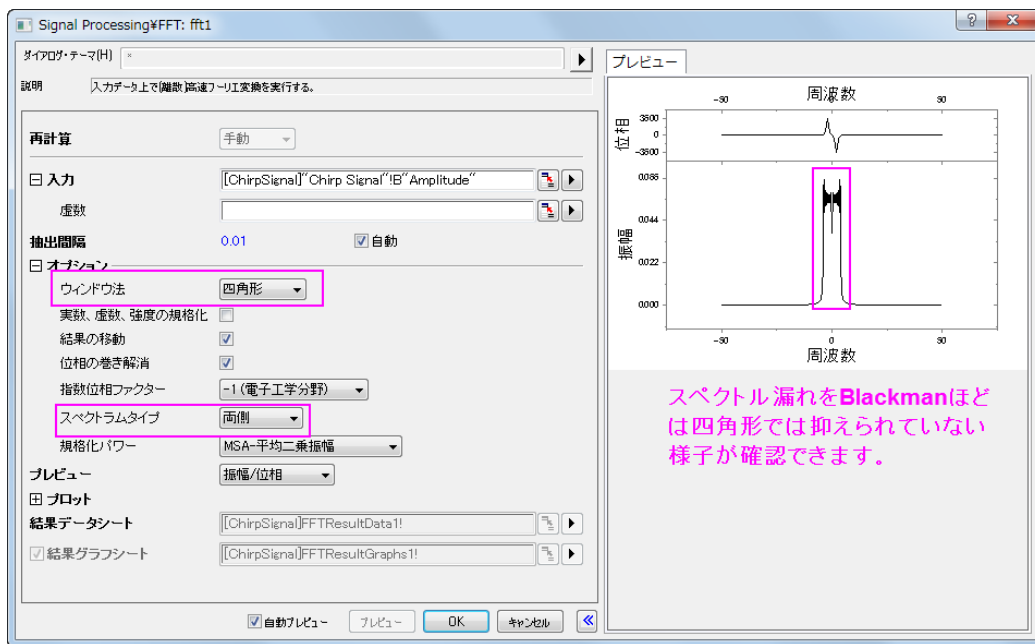
IFFT

このサンプルでは、FFT 結果から信号を復元する方法を示します。そのためには、FFT および IFFT 双方の設定を同じにし、スペクトルタイプは両側、ウィンドウ法は四角形にする必要があります。

1. 上の FFT 結果から始めます。緑の鍵のアイコンをクリックします。パラメータの変更を選択してダイアログを再度開きます。

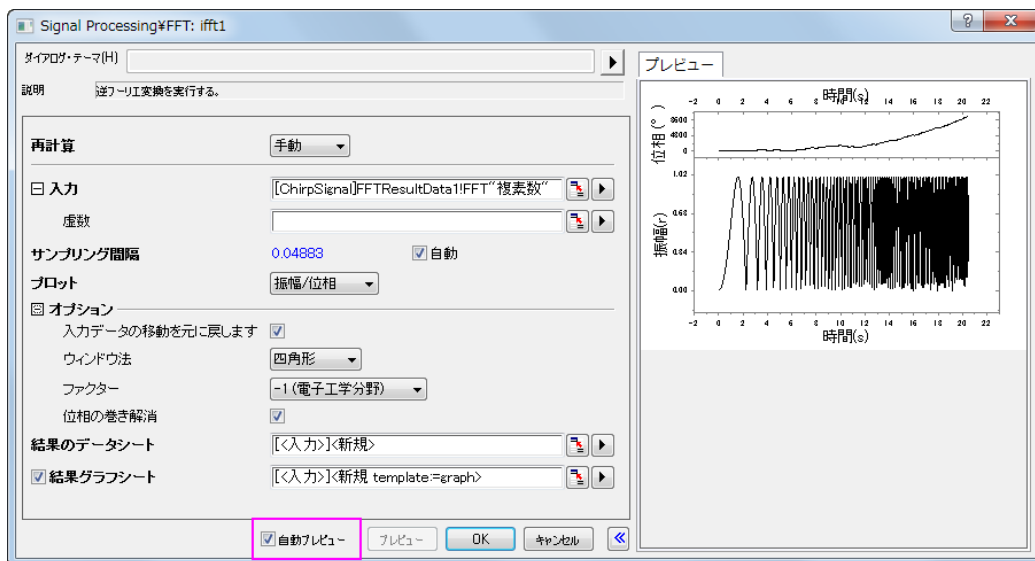


2. 上述したように、スペクトルタイプは両側、ウィンドウ法は四角形に設定する必要があるため、これらを変更します。



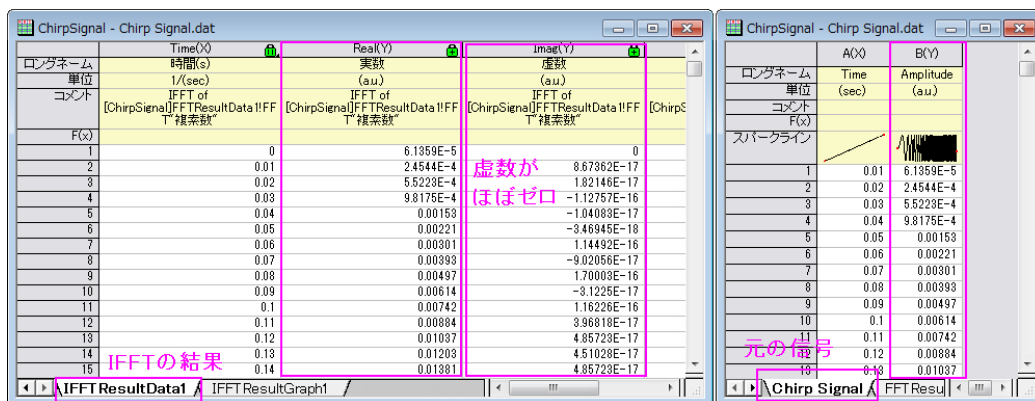
3. OK をクリックすると結果が変更されます。

4. **FFTResultData1** を開きます。1 列が複素数で、1 列は実数、もう 1 列は虚数であることがわかります。ここでは、複素数データを使用します(実数と虚数データを使用することもできます)。この列を選択して、**解析:信号処理:FFT:IFFT** を選択し、**Signal Processing\FFT: ifft1** ダイアログを開きます。(もし、実数と虚数データ列を使用する場合、**入力データ**として実数データを選択し、**虚数**として虚数データ列を選択します。)ダイアログの**自動プレビュー**チェックボックスにチェックを付け、右パネルでプレビューできるようにします。



5. デフォルトの設定のまま、**OK** をクリックします。

6. IFFT の結果(ワークシート IFFTResultData1)と元のデータを比べてみましょう。下図のように、2つのデータがほとんど同じであることがわかります。



4.3.2. FFT フィルタ

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ローパスフィルタ](#)
- [4 バンドパスフィルタ](#)

サマリー

Origin は FFT フィルタ、つまりフーリエ変換を使って入力信号の周波数成分を分析するフィルタリングを備えています。

FFT フィルタでは、ローパス、ハイパス、バンドパス、バンドブロック、しきい値、ローパスパラボリックの 6 種類のフィルターを利用できます。ローパスフィルターは、カットオフ周波数より大きいすべての周波数成分をブロックし、小さい周波数のみを通します。ハイパスフィルターはローパスフィルターの逆で、カットオフ周波数より小さいすべての周波数成分を除去します。

このチュートリアルは FFT フィルタでのローパス、バンドパスフィルタの使い方を学習します。

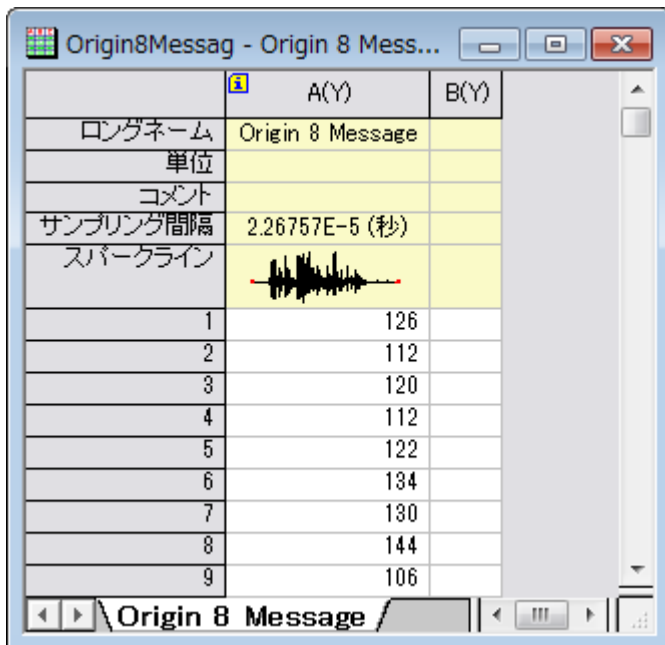
学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について解説します:

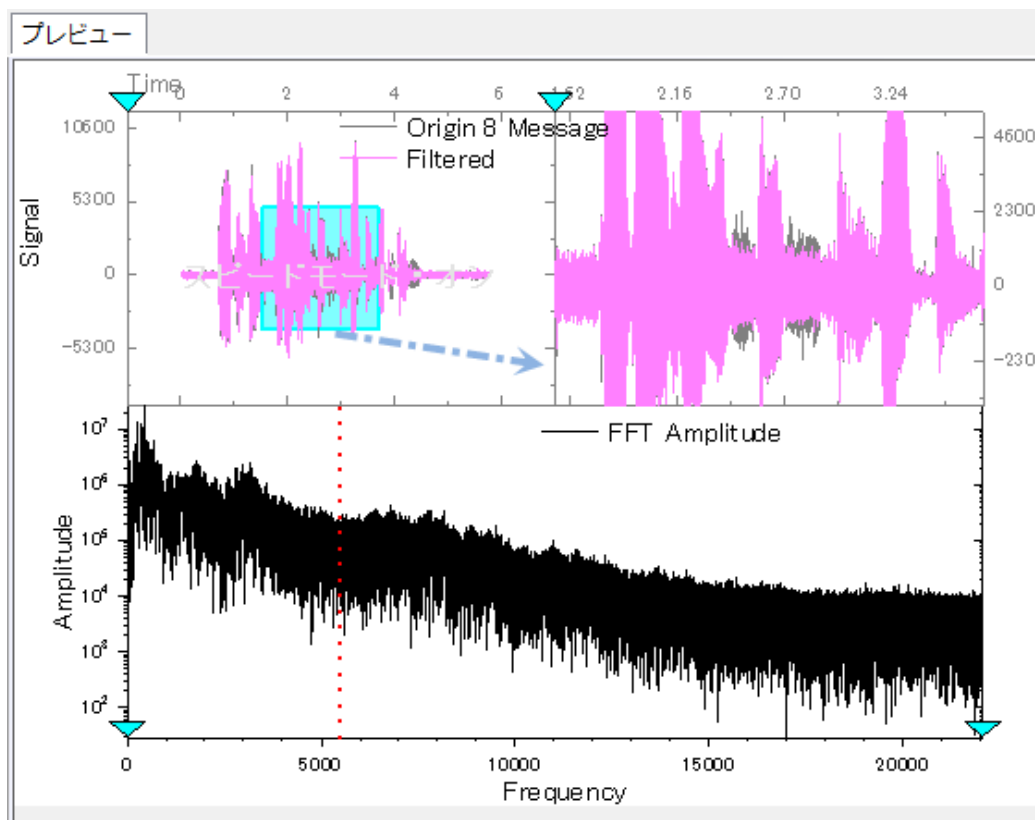
- ローパスフィルタを実行
- バンドパスフィルタを実行

ローパスフィルター

1. 新しいワークブックを用意します。
2. データ:インポート:音声(WAV)を選択して、<Origin インストールフォルダ>\Samples\Signal Processing\内の **Origin 8 Message.wav** をインポートします。デフォルト設定のままインポートします。

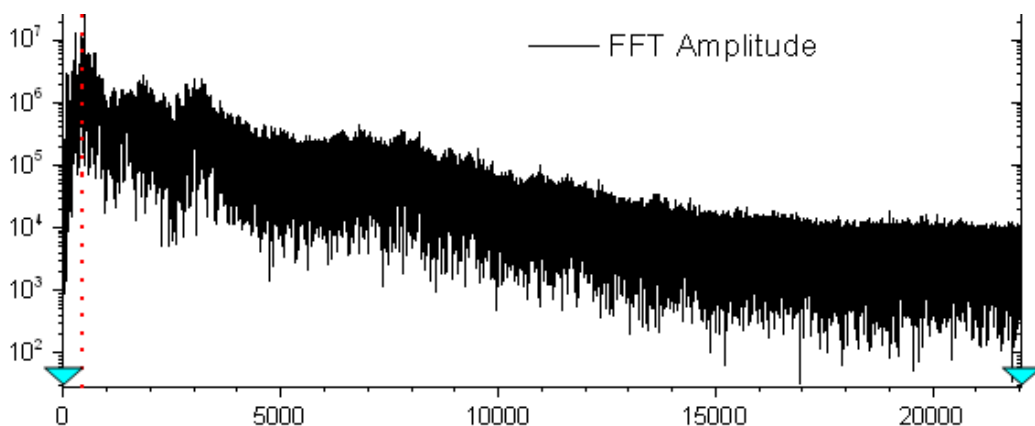


3. 列 A(Y)を選択して、2D グラフツールバーの ボタンをクリックし、折れ線グラフを作図します。
4. この信号は、音波であり、すでに高い周波数成分をノイズとみなすことができ、ブロックされるべきであることがわかっています。そのため、さらなる分析のために、低周波数成分を取得するため、FFT フィルタのローパスを使用します。
5. グラフがアクティブなことを確認して、解析:信号処理:FFT フィルタを選択してダイアログを開きます。
6. フィルタの種類がローパスに設定されていることを確認します。
7. 自動プレビューのチェックボックスにチェックを付け、プレビューパネルを有効にします。

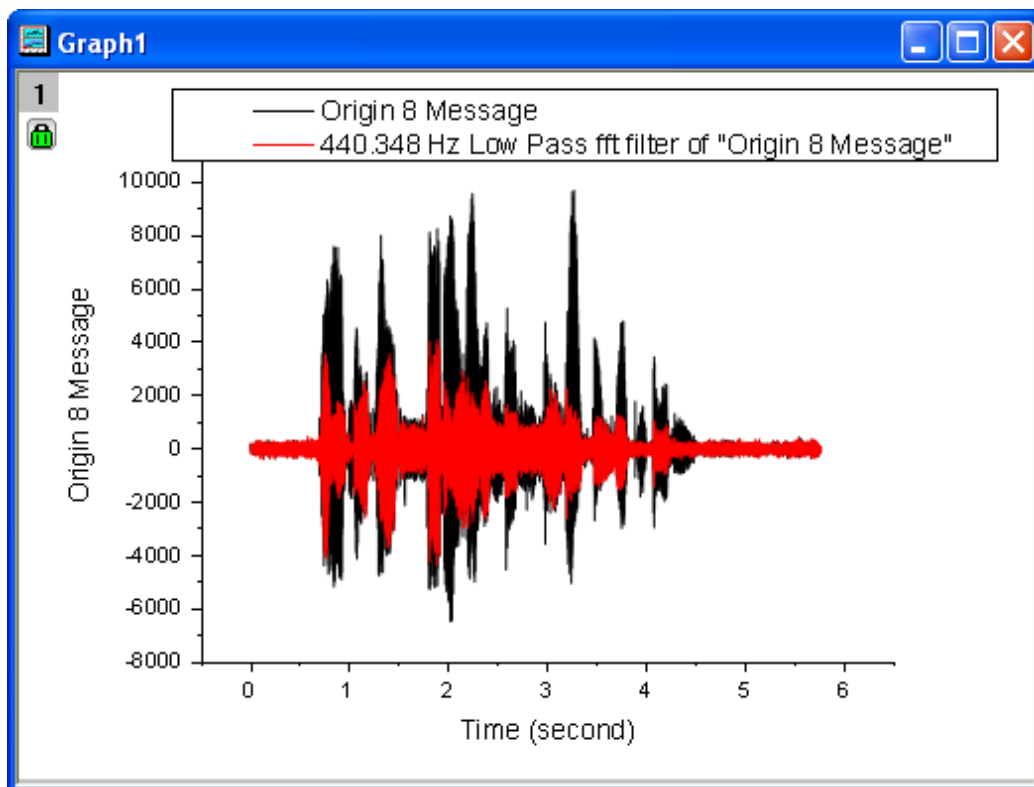


上の2つのグラフは時間領域における信号を表示し、下の画像では、高速フーリエ変換後の周波数領域の信号を示しています。赤い縦の点線は、カットオフ周波数を意味しています。この縦線を移動して、元の信号と、このパネルの上部にリアルタイムでフィルタリングされた信号間の比較をプレビューすることができます。

8. 振幅のピーク(下図のような)の X 位置に縦線を移動します。この操作では、人的誤差があるかもしれませんが、しかし、ここでは、大まかに信号をフィルタリングするので許容します。





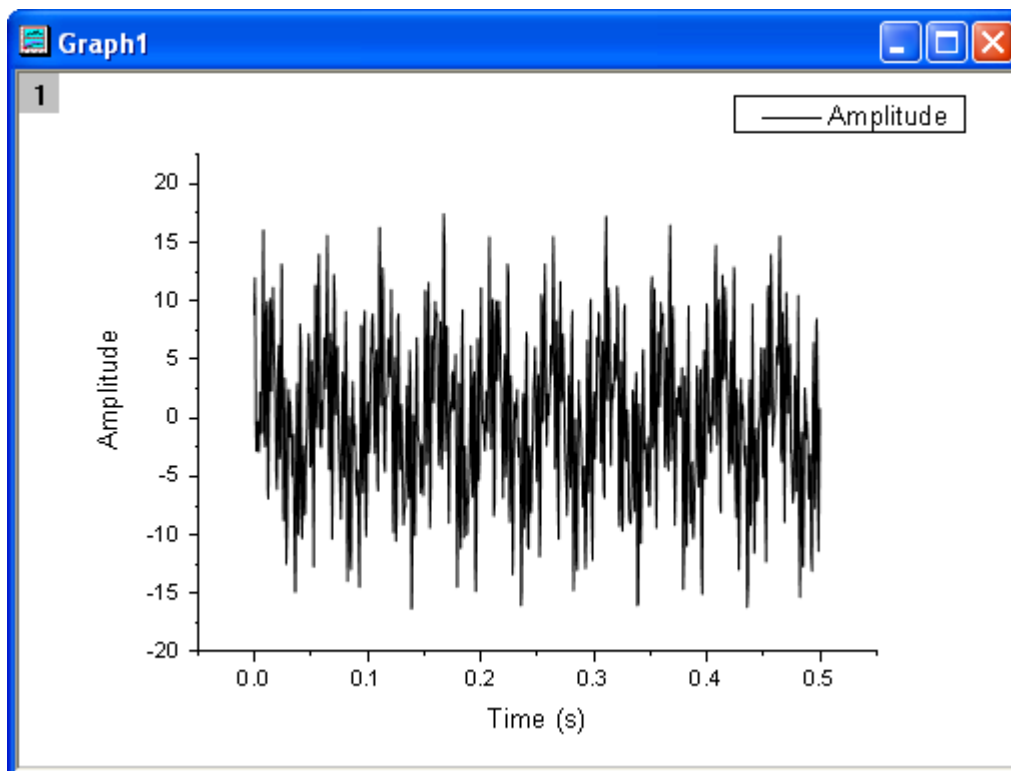
9. **OK** をクリックして、信号データに FFT フィルタを適用します。
10. グラフにフィルタ後のデータが追加されます。メニューの **グラフ操作: スピードモード** を選択してこのグラフのスピードモードを解除します。最終的なグラフは下図のようになります。



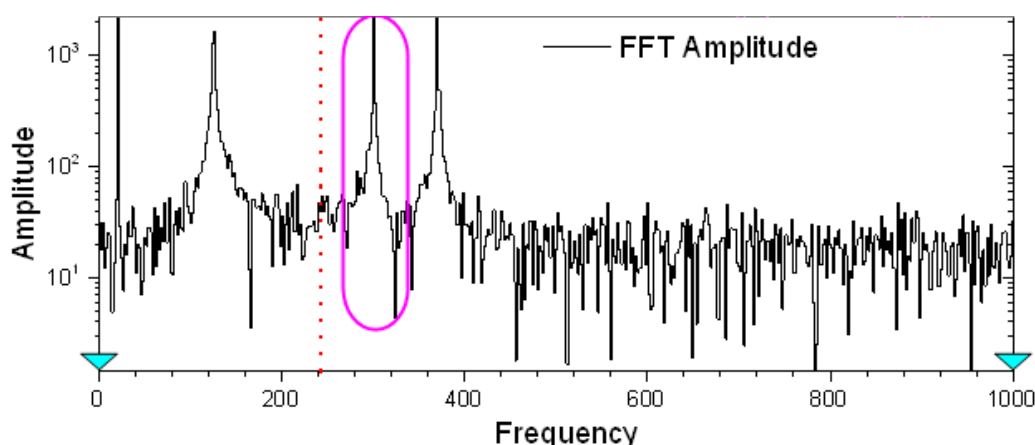
11. 結果グラフから、ローパスフィルタにより高周波数データがブロックされたことがわかります。

バンドパスフィルター

1. 新規ワークブックを開きます。
2. 単一 ASCII インポートボタン  をクリックして、<Origin EXE フォルダ>\Samples\Graphing 内にある **fftfiler3.dat** ファイルをインポートします。
3. 列 B を選択して、2D グラフツールバーの  ボタンをクリックし、折れ線グラフを作図します。



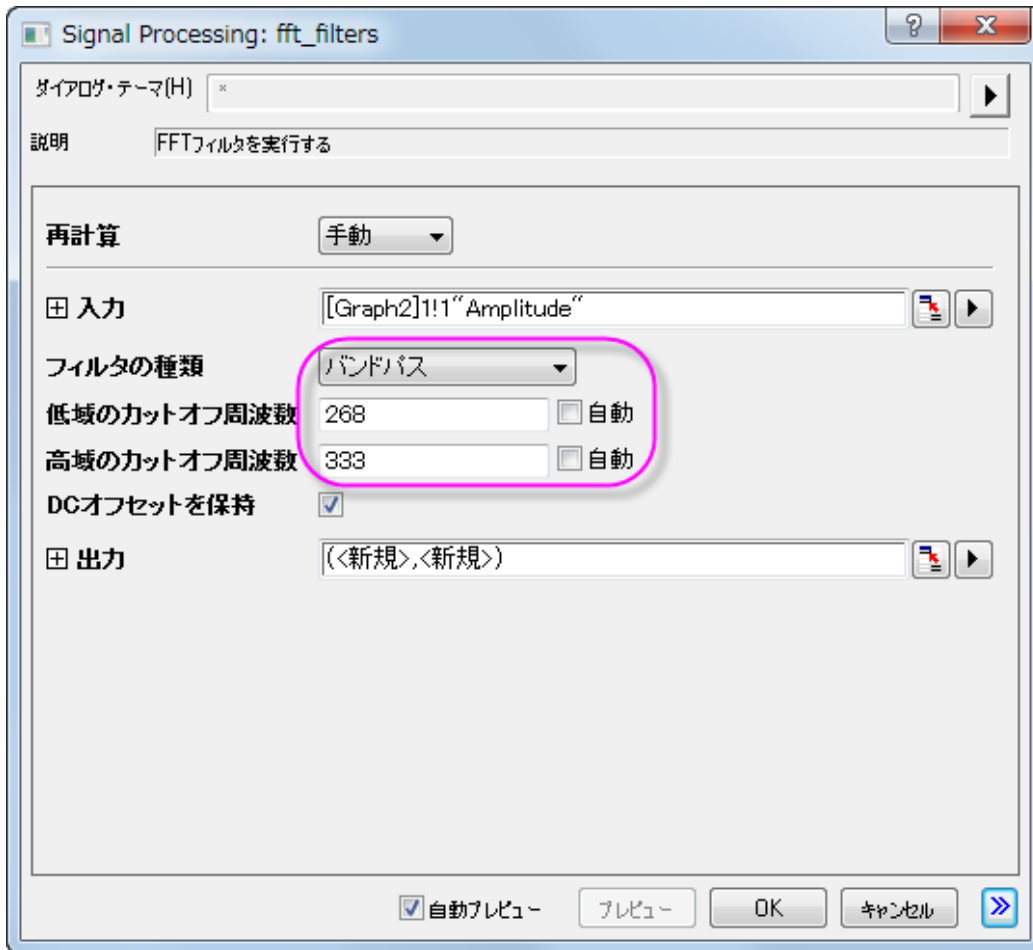
4. グラフが表示されたら、**解析: 信号処理: FFT フィルタ**を選択します。すると、**fft_filters** ダイアログボックスが開きます。
5. **自動プレビュー**のチェックボックスにチェックを付け、**プレビューパネル**を有効にします。
6. 周波数領域のプロット(下)から、この信号は、複数の異なる周波数での成分を持っていることがわかります。ここでは、約 300Hz の成分を取得します。そのために**バンドパス**の手法を使用します。



7. **フィルタの種類**を**バンドパス**に変更します。

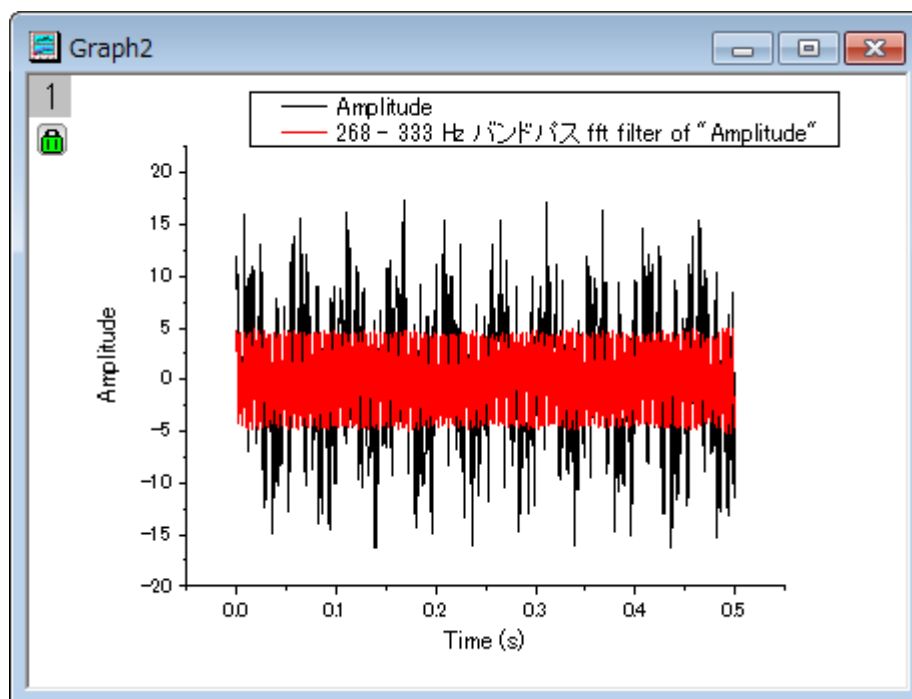
バンドパスが選択されると、2つの垂直な赤い線がプレビューグラフ内に配置され、上部/下部のカットオフ周波数を参照します。これら2つの線を移動し、このパネルの上部にあるフィルタリング結果のリアルタイムプレビューを取得できます。

8. ここでは、カットオフ周波数は以下のように設定します。



目的の振幅のピークがカットオフ周波数範囲内に留まるようにさえすれば、上下のカットオフ周波数の値は若干異なるケースであっても、フィルタリングの誤差を許容できると考えることができます。

9. **OK** ボタンをクリックしてフィルタリングを実行します。
10. フィルタリングによって 300Hz 周辺の周波数を取り出すことができました。



4.3.3. スムージング

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 様々な手法によるスムージング](#)
 - [3.1 隣接平均](#)
 - [3.2 Savitzky-Golay](#)
 - [3.3 パーセンタイルフィルタ](#)
 - [3.4 FFT フィルタ](#)
- [4 ウェーブレットを用いたスムージング](#)
- [5 行列をスムージング](#)

サマリー

スムージングは、信号からノイズを除去するために使用される、一般的なテクニックです。Origin は、隣接平均、Savitzky-Golay、パーセンタイルフィルタ、FFT フィルタなどのいくつかのスムージング手法をサポートしています。さらに、ウェーブレットをベースにしたツールも利用可能です。

行列データに対しては、Origin は 2 つの方法によるスムージングを提供しています。もし、列または行の数が 32 より少ない場合、行列を拡張し、その後実際のサイズに縮小します。31 よりも大きい場合は、最初に縮小する場合、行列は、その後拡大します。

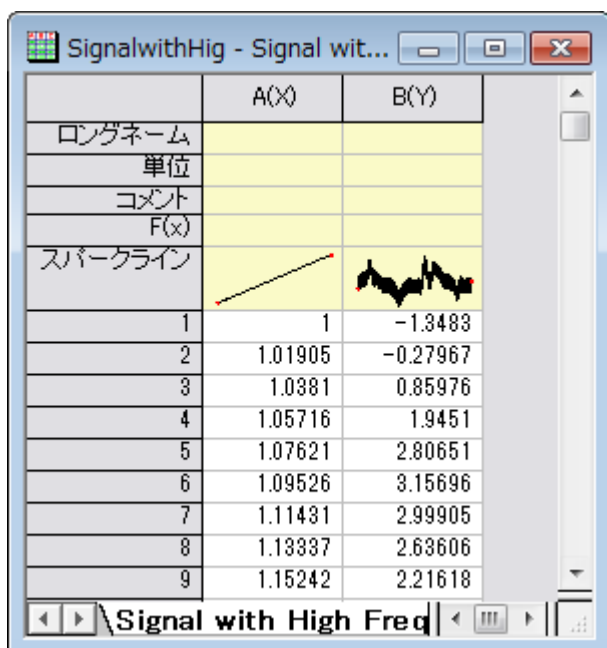
学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- 様々な手法によるスムージング
- ウェーブレットで信号をスムージングする
- 3D 曲面をスムージングする

様々な手法によるスムージング

1. 新しいワークブックを用意します。
2. メニューから、**データ:インポート:単一 ASCII ファイル...** を選択し、<Origin Installation Directory>\Samples\Signal Processing\ フォルダにある **Signal with High Frequency Noise.dat** データファイルをデフォルト設定でインポートします。

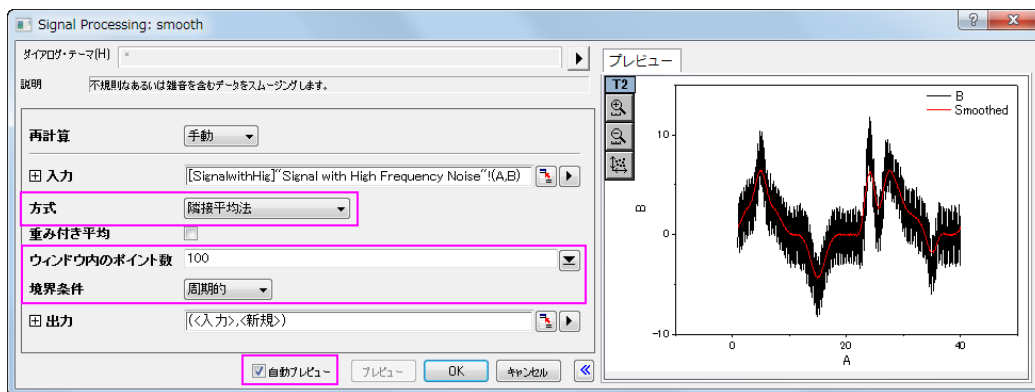


3. ワークシートの B 列を選択します。メニューから**解析:信号処理:スムージング**と選択し、(もしこの機能を以前使用したことがある場合は、さらに**ダイアログを開く**を選択します)**スムージング: smooth** ダイアログを開きます。

隣接平均法

隣接平均法は、データの広範な平滑化を実行します。

1. 方式に隣接平均法を選択します。ウィンドウ内のポイント数を 100 に、境界条件を周期的にします。自動プレビューにチェックを付け、右パネルでプレビューを表示します。

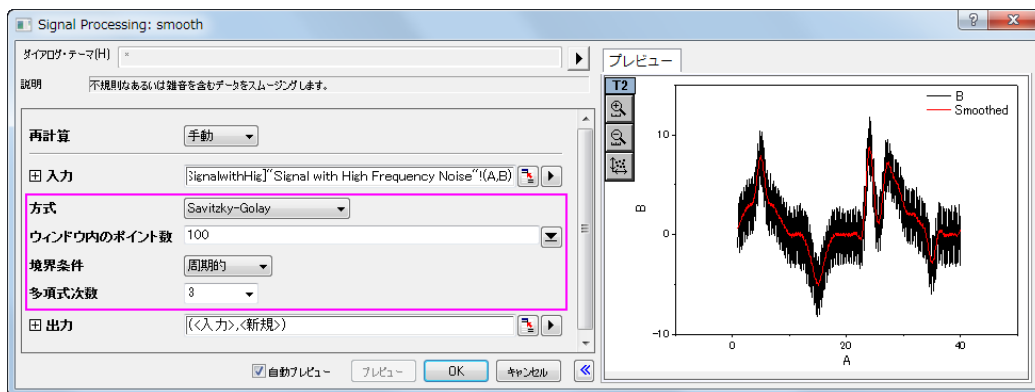


2. OK をクリックして、結果を作成します。

Savitzky-Golay

Savitzky-Golay 法は、信号ピークの形状を保存するのに適しています。

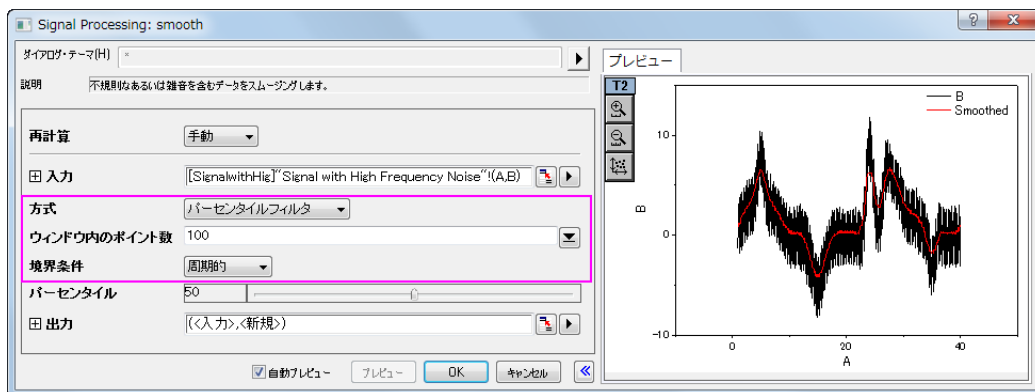
1. 再度 B 列を選択します。解析メニューにて、信号処理:スムージング:ダイアログを開く...を選択します。
2. スムージングダイアログボックスにて、方式を Savitzky-Golay とします。ウィンドウ内のポイント数を 100 に、境界条件を周期的に、多項式次数を 3 とします。



3. OK をクリックします。

パーセントイルフィルタ

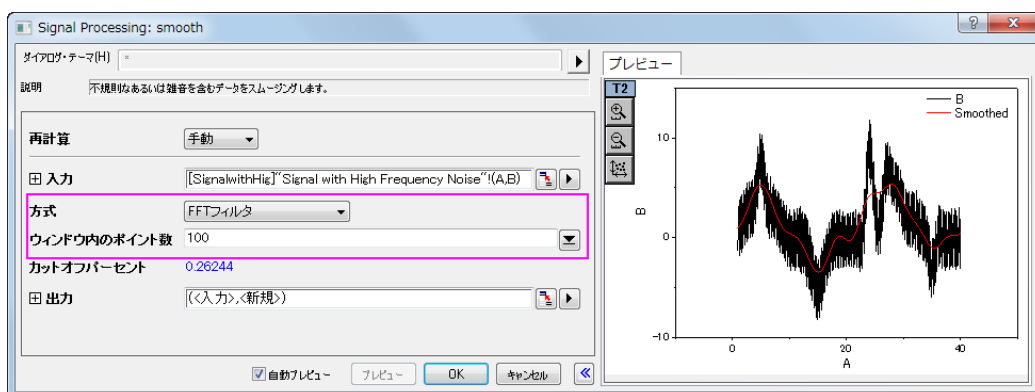
1. 再度 B 列を選択します。解析メニューにて、信号処理:スムージング:ダイアログを開く...を選択します。
2. 方式をパーセントイルフィルタにします。ウィンドウ内のポイント数を 100 に、境界条件を周期的に、パーセントイルはデフォルト設定の 50 とします。



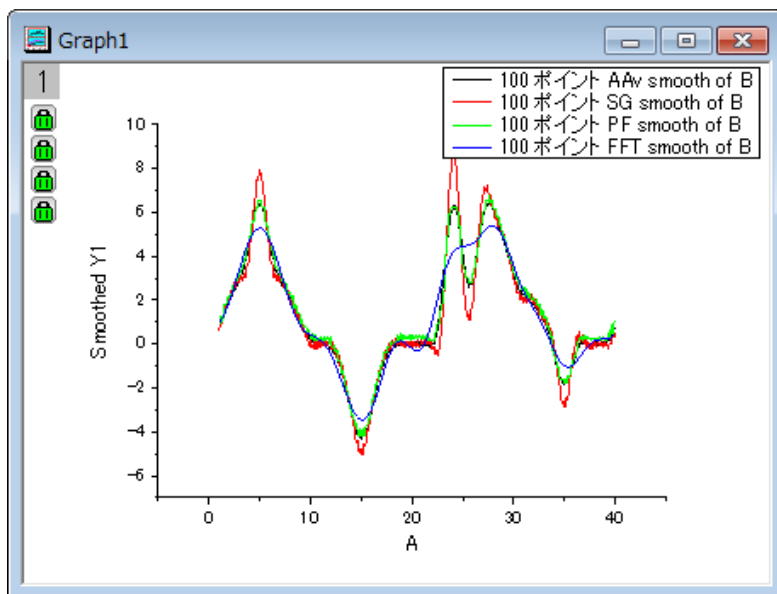
3. **OK** ボタンをクリックします。

FFT フィルタ

1. 再度 B 列を選択します。**解析メニューにて、信号処理:スムージング:ダイアログを開く...**を選択します。
2. **方式を FFT フィルタにします。ウィンドウ内のポイント数を 100 にします。**



3. **OK** をクリックして、ダイアログを閉じます。
4. これで、ワークシートに 4 つの結果データ列が追加されます。列 C、D、E、F を選択して、メニューの**作図>基本の 2D グラフ:折れ線**と選択してこれら 4 つのデータののグラフを作図します。



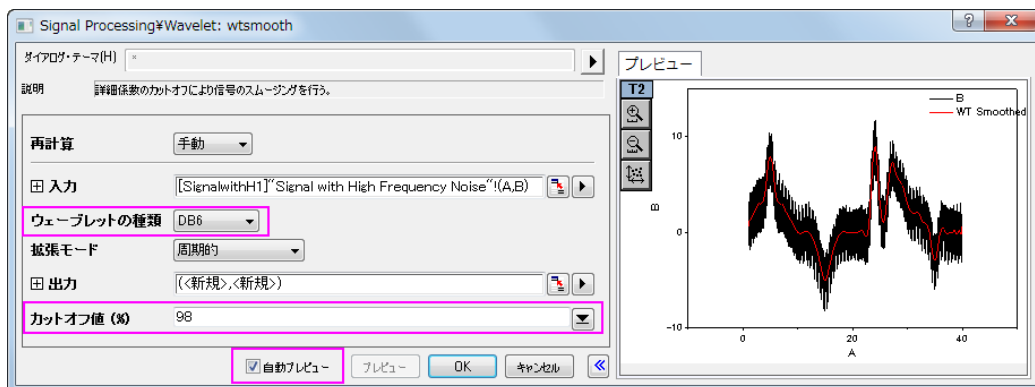
5. 4つの方法の結果を比較すると、Savitzky-Golay法がデータ内のピークを保存するのに最適で、一方FFTフィルタ法はピークの保存には適さないことがわかります。

ウェーブレットを用いたスムージング

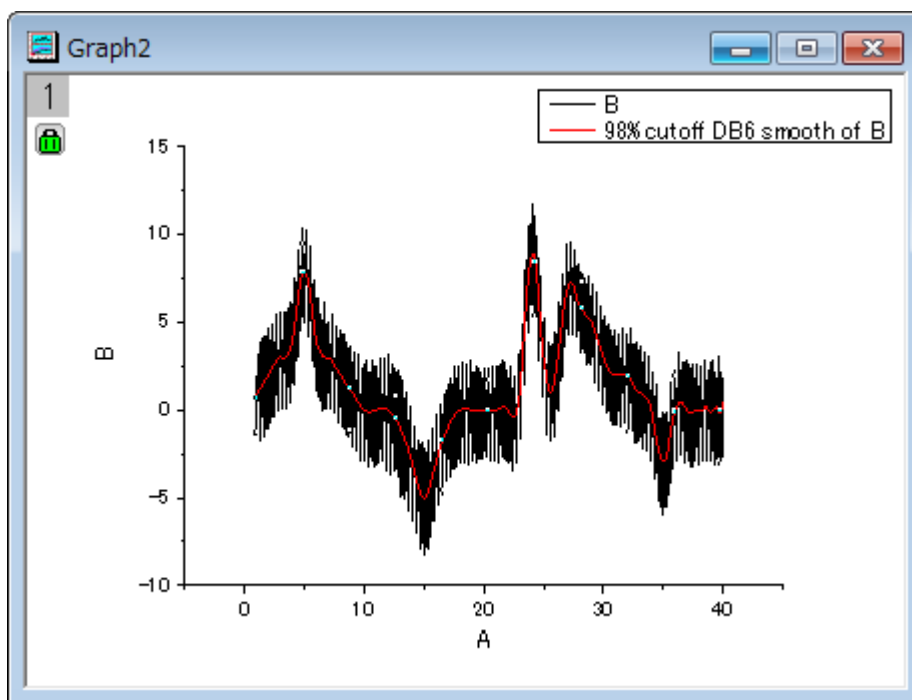
1. 新しいワークブックを用意します。
2. メニューから、**データ:インポート:単一 ASCII ファイル...** を選択し、`<Origin Installation Directory>\Samples\Signal Processing\` フォルダにある **Signal with High Frequency Noise.dat** データファイルをデフォルト設定でインポートします。

	A(X)	B(Y)
ロングネーム		
単位		
コメント		
F(x)		
スパークライン		
1	1	-1.3483
2	1.01905	-0.27967
3	1.0381	0.85976
4	1.05716	1.9451
5	1.07621	2.80651
6	1.09526	3.15696
7	1.11431	2.99905
8	1.13337	2.63606
9	1.15242	2.21618

3. B 列を選択して、**解析:信号処理:ウェーブレット:スムージング** を選択し、**スムージング:wtsmooth** ダイアログを開きます。
4. ダイアログで、**ウェーブレットの種類**を **DB6** にし、**カットオフ値(%)**を 98 にします。ダイアログの**自動プレビュー**チェックボックスにチェックを付け、右パネルでプレビューできるようにします。

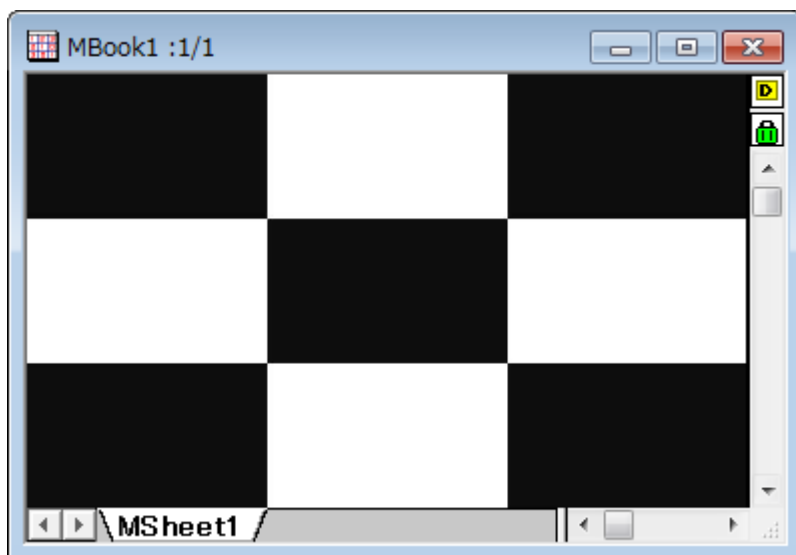


5. **OK** をクリックしてダイアログを閉じ、レポートを作成します。
6. 元のデータと比べるために、全ての列を選択して**作図>基本の 2D グラフ:折れ線**と選択してグラフを作図します。

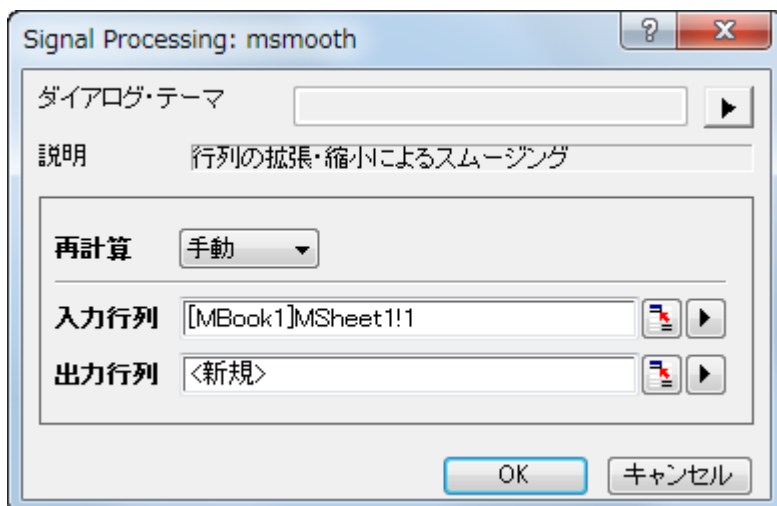


行列をスムージング

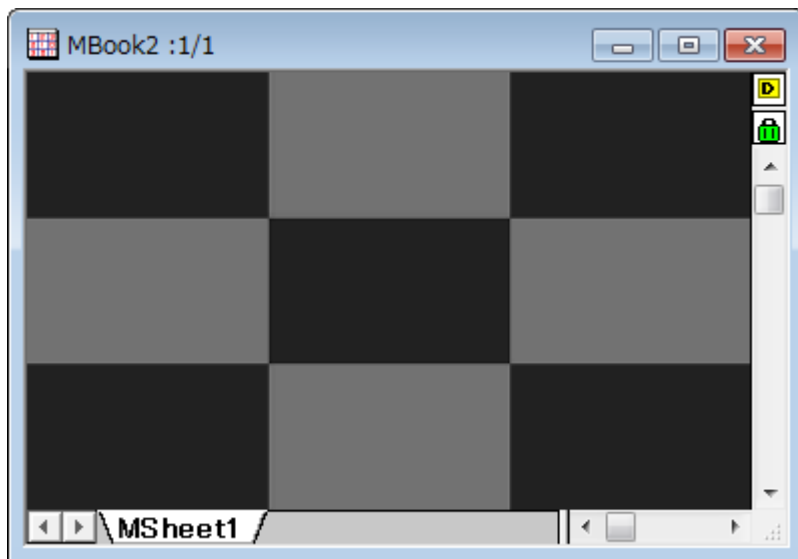
1. 新しい行列ブックを用意します。
2. データ:ファイルからインポート:イメージファイルを行列にインポートを選択してサブフォルダ<Origin Installation Directory>\Samples\Image Processing and Analysis\の下の画像 **scale.jpg** をインポートします (implImage ダイアログボックスが開いていれば、デフォルト設定のまま **OK** を押します)。
3. Origin のスムージングは画像には適用できないので、まず画像を行列データに変換する必要があります。メニューから、**イメージ:変換:データに変換**を選択します。デフォルト設定のまま、**OK** ボタンをクリックします。
4. 変換された行列データをアクティブにし、メニューから: **表示:イメージモード**を選択して行列データをイメージとして表示します。



5. **解析:信号処理:スムージング**を選択してスムージングを行います。**スムージング:msmooth** ダイアログが開きます。



- デフォルト設定のまま、OK ボタンをクリックします。メニューから表示: イメージモードを選択して結果を表示します。



4.3.4. STFT (短時間フーリエ変換)

サマリー

短時間フーリエ変換 (STFT) は、時間-周波数分析で非定常信号の分析に適しています。そして STFT は、時間の経過とともにどのように、周波数が変化するかについての情報を提供することができます。時間軸に沿ってウィンドウを移動し、時間と周波数の変化の関係が識別できます。

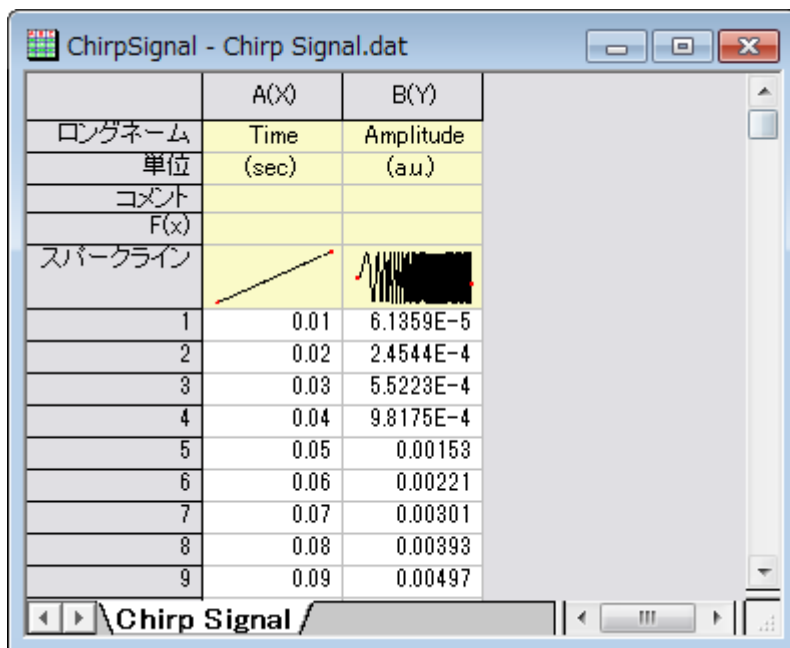
学習する項目

このチュートリアルで以下のことを行います:

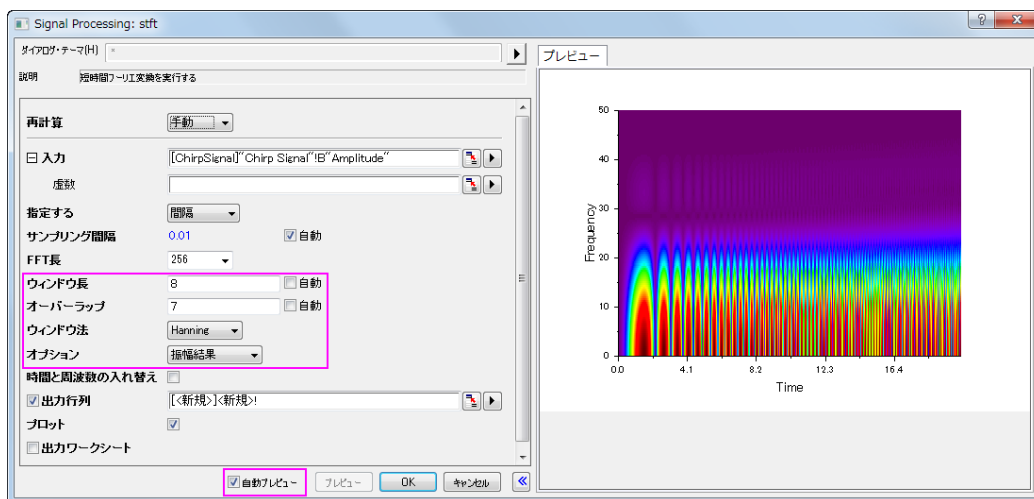
- 短時間フーリエ変換 (STFT) を実行する
- 時間と周波数解像度を向上させるためダイアログの設定を変更する
- 解像度の向上のため、ウィンドウの種類を変更する

ステップ

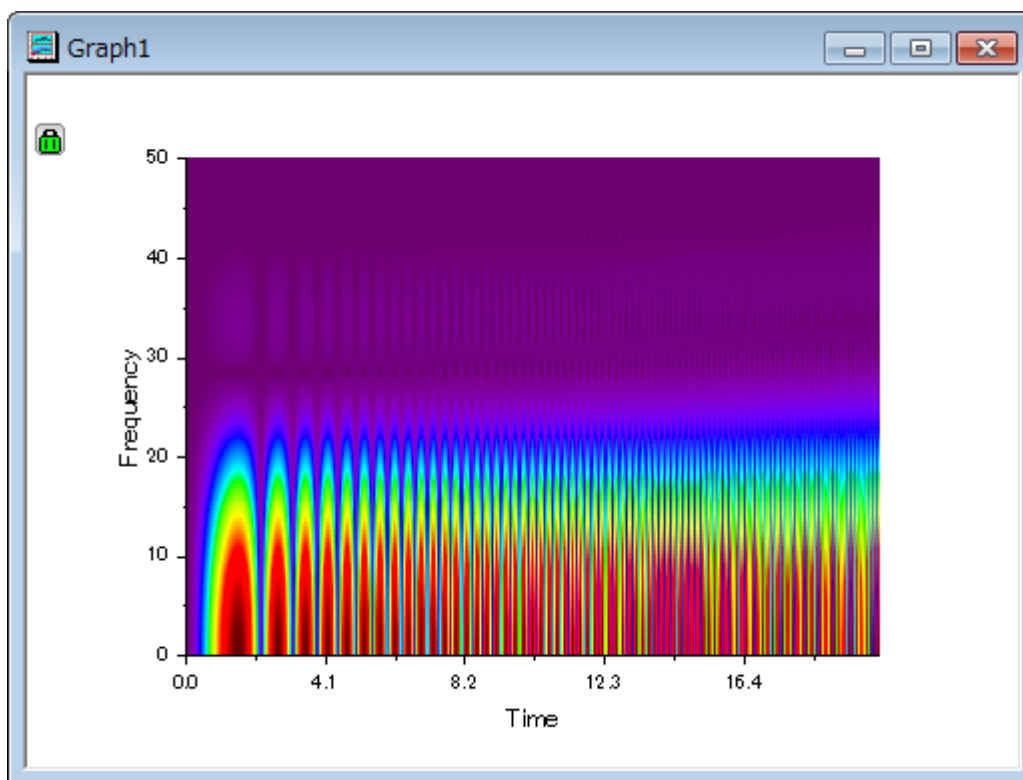
- 新しいワークブックを作成し、<Origin インストールディレクトリ>\Samples\Signal Processing\Chirp Signal.dat をインポートします。



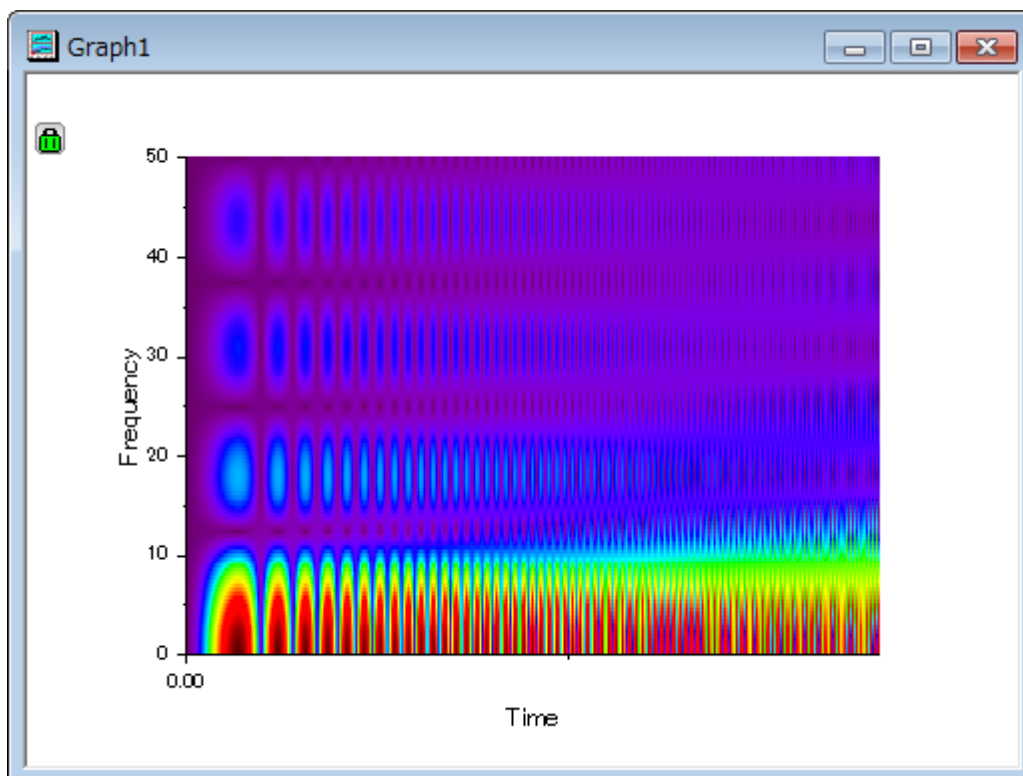
2. B列を選択して、**解析:信号処理:STFT**を選択し、**Signal Processing: stft** ダイアログを開きます。
3. ダイアログの**自動プレビュー**チェックボックスにチェックを付け、右パネルでプレビューできるようにします。**ウィンドウ長**の項目にある**自動**のチェックを外し、**ウィンドウ長**を8にし、**オーバーラップ**を7に設定します。**ウィンドウタイプ**を**Hanning**、**オプション**は**振幅結果**にします。



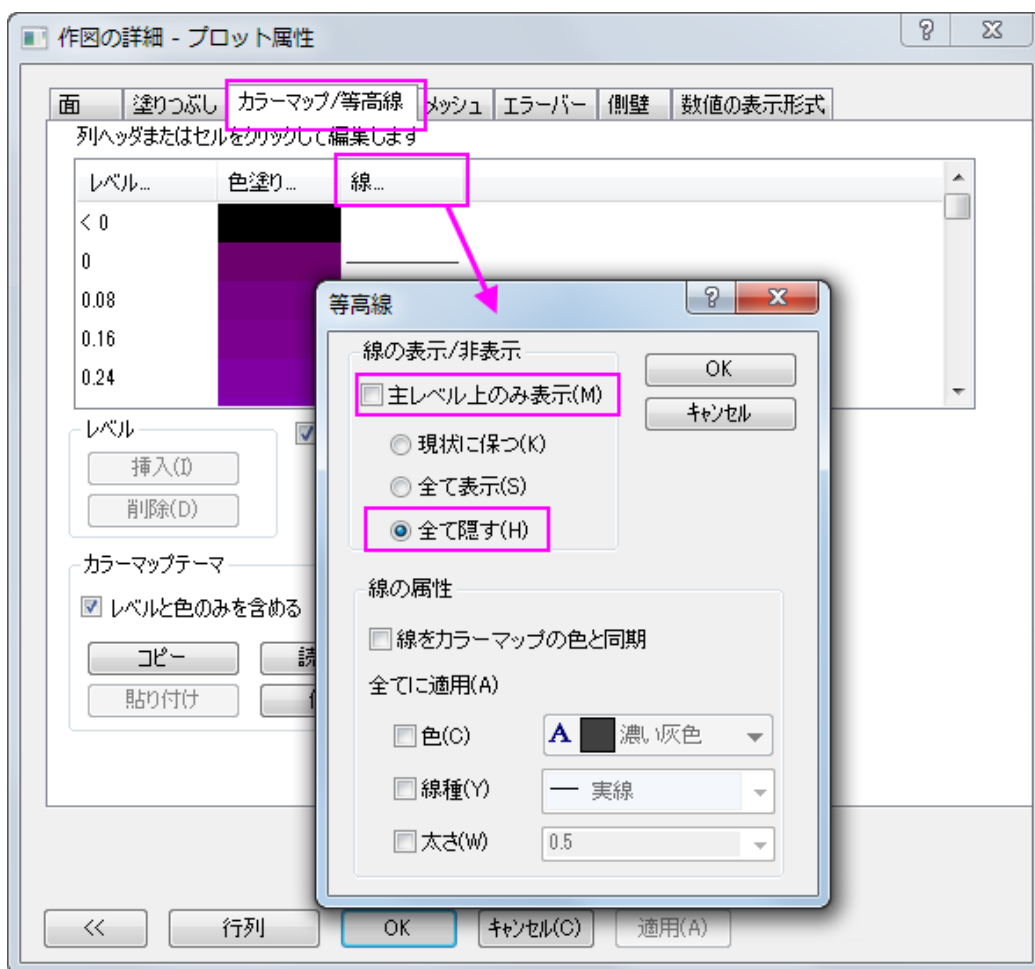
4. **OK** ボタンをクリックして、この設定で STFT を実行し、行列データと等高線グラフを含む結果を取得します。



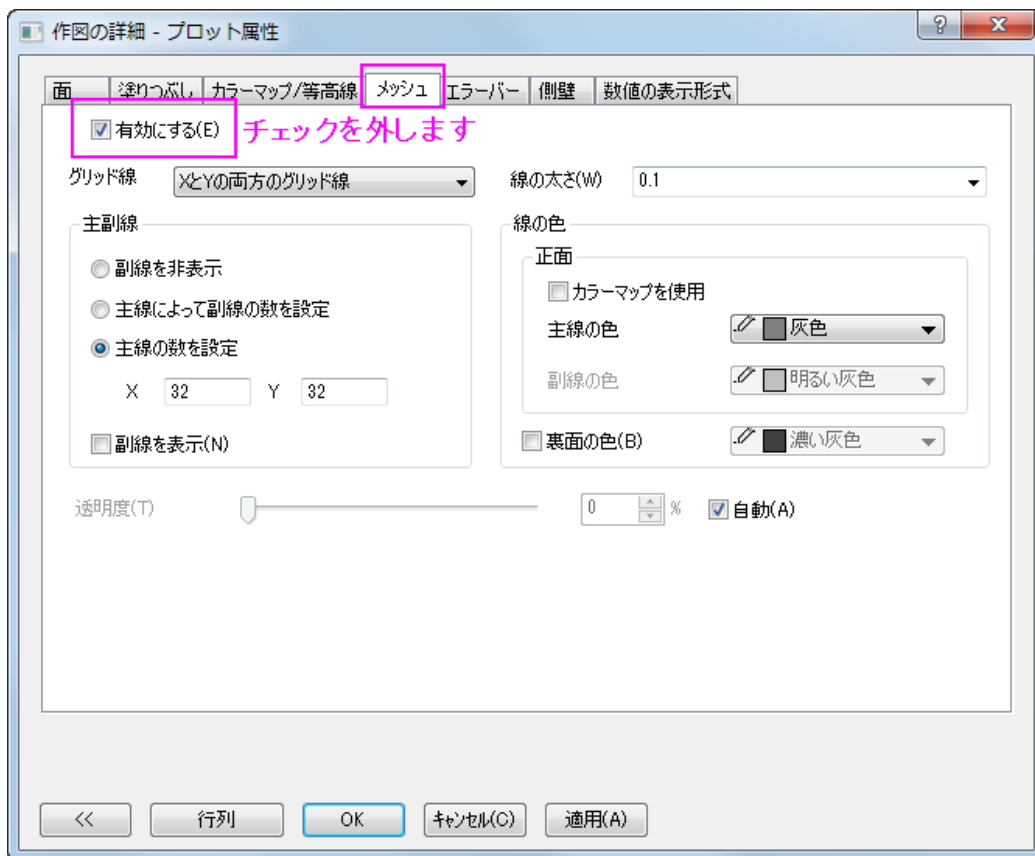
5. 上図を見ると時間解像度は良好ですが、周波数は明らかではないことがわかります。グラフ内の鍵のアイコンをクリックして、コンテキストメニューから**パラメータの変更**を選択して、ダイアログを再度開きます。**ウィンドウ法を四角形**に変更して**OK** ボタンをクリックします。



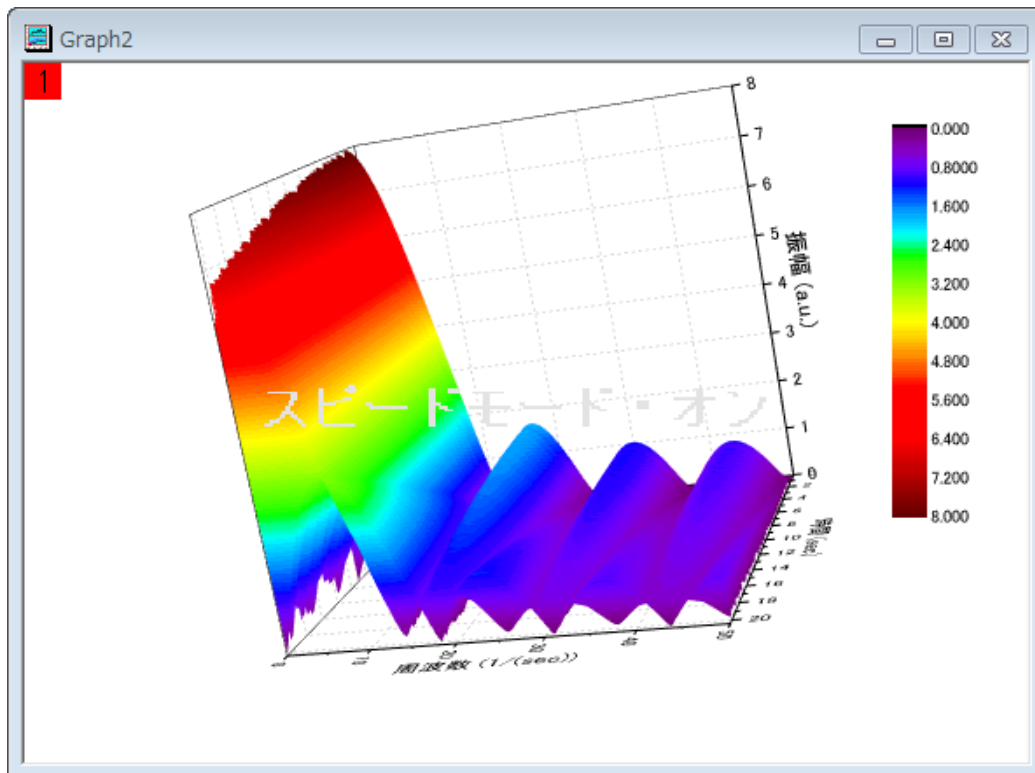
6. 時間と周波数解像度がよくなりました。時間と周波数ともに最良な解像度を得ることはできないので注意してください。片方が良く、片方が悪い場合、それらのバランスを取ることはできます。
7. 3次元的に結果を表示するため、結果行列をアクティブにし、メニューから**作図:3D 曲面:カラーマップ曲面**を選択して3D 曲面図を作図します。
8. 3D グラフ上でダブルクリックして、**作図の詳細**ダイアログを開き、左パネルで**カラーマップ/等高線**タブを開きます。線ヘッダをクリックして**等高線**ダイアログを開き、全ての線を非表示にします。



9. **メッシュ**タブを開き、**有効にする**チェックを外してメッシュ線を非表示にします。



10. **OK** をクリックして終了します。グラフを回転して下図のように見やすくします。





4.3.5. IIR フィルタ

サマリー

Origin では IIR (無限インパルス応答、Infinite Impulse Response) 型のデジタルフィルタのデザイン、分析、活用を行えます。IIR フィルタは **Butterworth**、**第一種 Chebyshev**、**第二種 Chebyshev**、**楕円** の 4 つの方法を備えています。

これで信号処理を行うユーザに、より多くの選択肢を提供します。

必要な Origin のバージョン: 9.0SR0

学習する項目

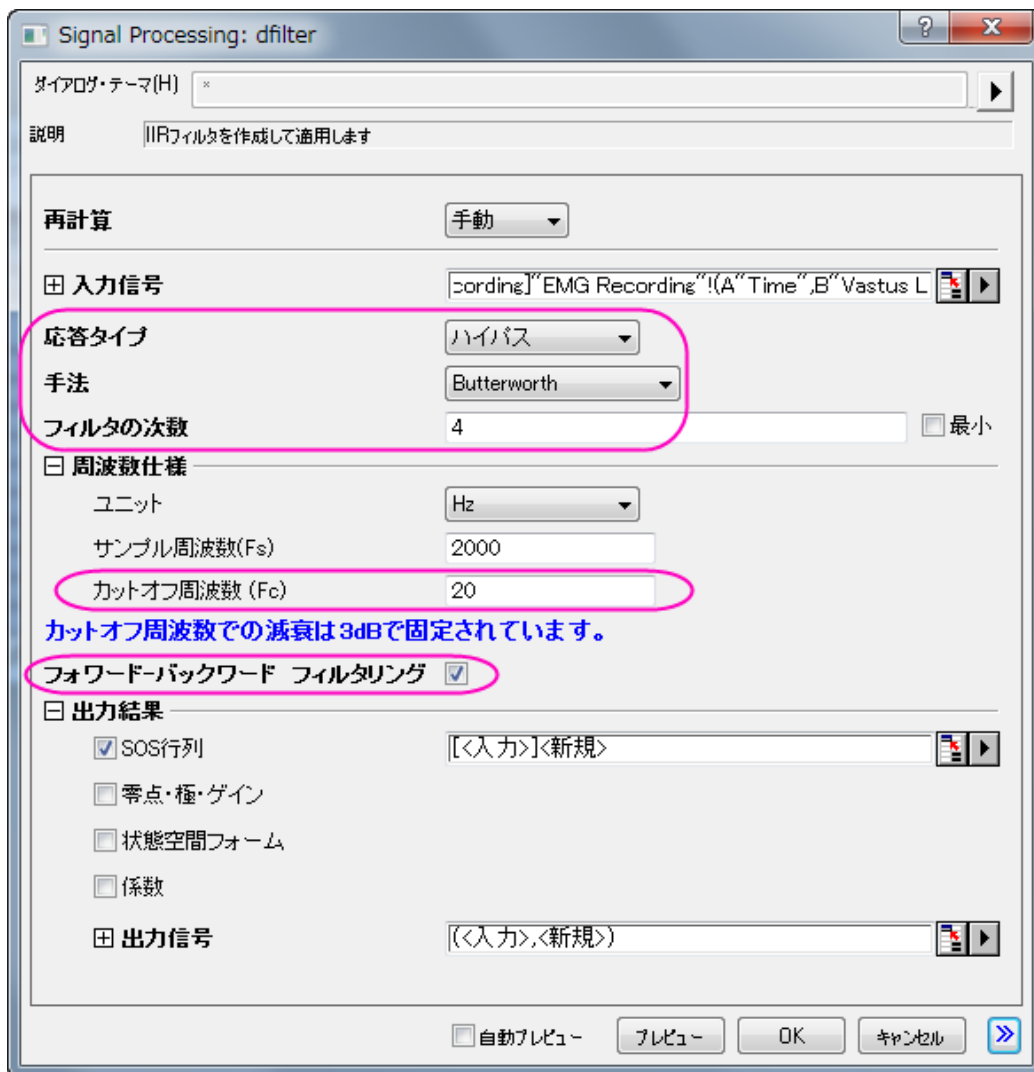
このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- IIR フィルタの作成と活用
- IIR フィルタと FFT フィルタの違いを比較

ステップ

IIR フィルタの作成と活用

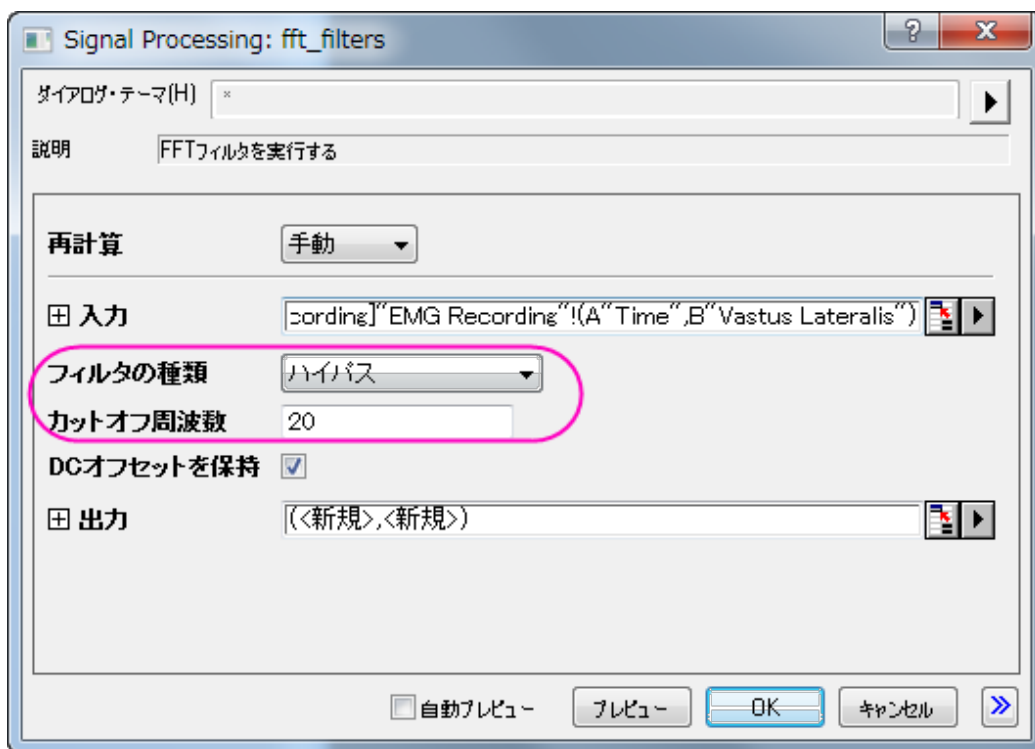
1. 新しいワークブックを開き、**EMG Recording.dat** ファイルを **\Samples\Signal Processing** から開きます。
2. 列 B を選択し、メニューから **解析: 信号処理: IIR フィルタ** と操作してダイアログを表示します。
3. レスポンスタイプを **ハイパス** に設定し、手法は **Butterworth** のままにします。そして、フィルタ順の **最小** のチェックを外して **4** と入力します。周波数仕様ブランチでは **カットオフ周波数 (Fc)** を **20** に設定します。そして **Forward-Backward Filtering** のチェックをつけます。ダイアログの設定は次の図のようになり、IIR フィルタが作成されます。







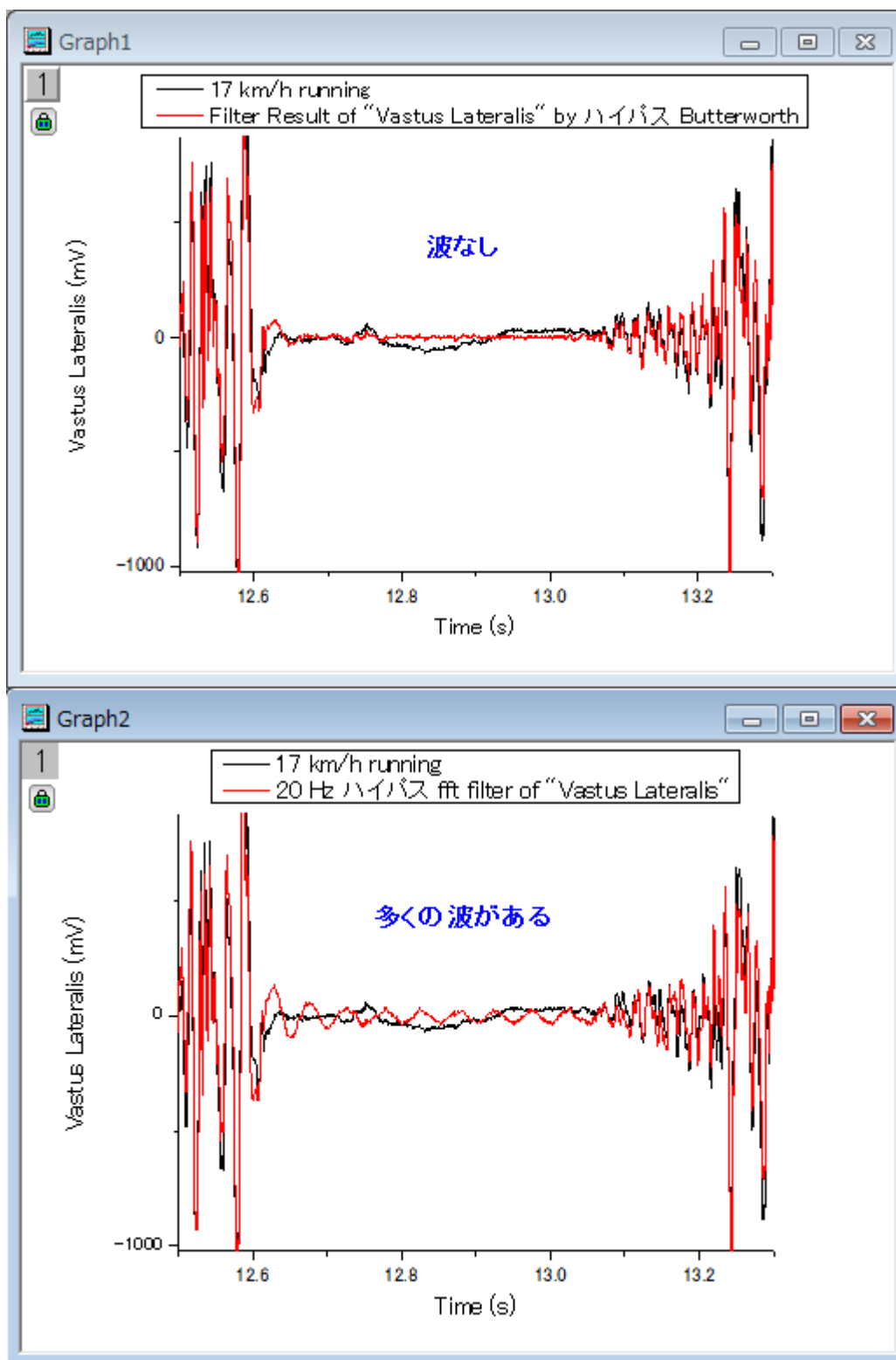
4. **OK** をクリックして作成した IIR フィルタで入力データセットを処理します。
5. 新しい列が元のデータセットに追加され、フィルタ後のデータとして表示されます。そして、新しい SOSMatrix ワークシートが作成されます。

FFT フィルタと結果を比較する

1. 元のワークシートで列 B を選択します。そして、**解析: 信号処理: FFT フィルタ**と選択して FFT フィルタを実行します。
2. 開いたダイアログで、フィルタの種類で**ハイパス**を選択し、カットオフ周波数を **20** に設定します。




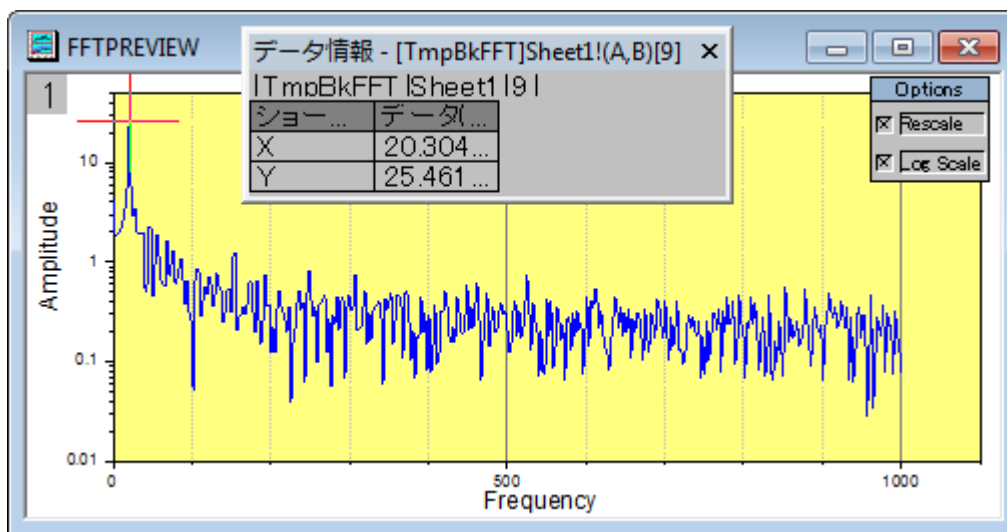
- EMGRecording ワークシートの列 C は先程作成した IIR フィルタでフィルタをかけた結果です。列 B と列 C を選択して、ボタン  をクリックし、折れ線グラフを作成します (Graph1)。
- スケールインボタン  を使って 12.5s から 13.3s の範囲にズームインします。
- EMGRecording ワークシートの列 E は FFT フィルタのフィルタ結果です。列 B と列 E を選択してボタン  を押す事で折れ線グラフを作図します (Graph2)。
- 再びスケールインボタン  を使って 12.5s から 13.3s の範囲にズームインします。このグラフを使用して視覚的な比較を行えます。




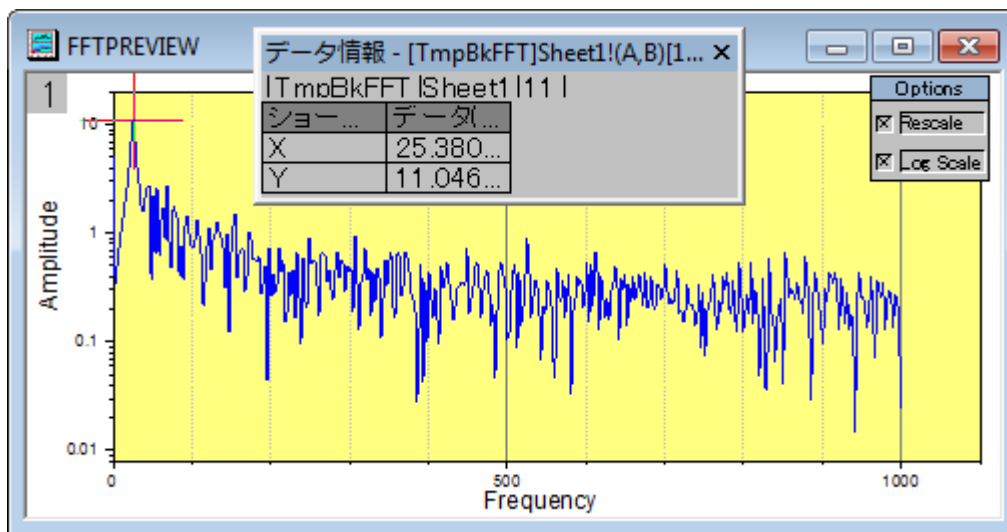
- 上記画像から分かる事は、FFTフィルタの結果には小さな波が多くありますが、IIRフィルタの結果にはほとんどありません。

FFT フィルタで出来る小さな波

1. 列 E を選択して折れ線グラフを作成するために  ボタンをクリックします (Graph3)。
2. Graph3 をアクティブにして、メニューから **ガジェット: FFTROI ツール** と選んでから X スケールを **12.664** から **13.052** までにするように設定します。
3. OK をクリックしてプレビューウィンドウを開くと、小さな波の正体が 20.125 Hz にあるサインである事が分かります。



4. では、この 20.125 Hz の波紋を取り除いてみましょう。そのためには 25Hz のハイパスフィルタをもう一度行います。列 E を選択したまま、メニューから **解析: 信号処理: FFT フィルタ** と操作します。
5. フィルタの種類から **ハイパス** を選び、カットオフ周波数を **25** にします。
6. 結果は列 G に表示されるので、列 G を選択して折れ線グラフを表示するために  ボタンをクリックします (Graph4)。
7. Graph4 をアクティブにし、メニューから **ガジェット: FFT** を選択して X スケールを **12.664** から **13.052** へ設定します。プレビューウィンドウにはそれでも小さな波が見られます。周波数が 20.125 Hz から 25.157 Hz に移動しただけです。



- つまり、この波は FFT フィルタでは取り除けない事を示しています。



4.3.6.2D FFT とフィルタ

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ステップ](#)
 - [3.1 2D FFT](#)
 - [3.2 2D FFT](#)
 - [3.3 2D FFT フィルタ](#)

サマリー

2D FFT (2次元の高速フーリエ変換) は、2D 信号 (行列) データに対して周波数スペクトルを分析することができます。逆に、2D IFFT (2次元逆高速フーリエ変換) は 2次元周波数スペクトルから 2D 信号を再構成することができます。OriginPro は、2D 信号にフィルタリングを実行する 2D FFT フィルタと一緒に、時間と 2次元の周波数ドメイン間の変換を提供します。

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

1. 画像をデータに変換する
2. 中心部への DC シフトのある行列データに 2D FFT を実行する
3. 2D FFT の結果に 2D IFFT 実行し、元の行列データを修正する

4. 行列データに対して 2D FFT フィルタを実行する

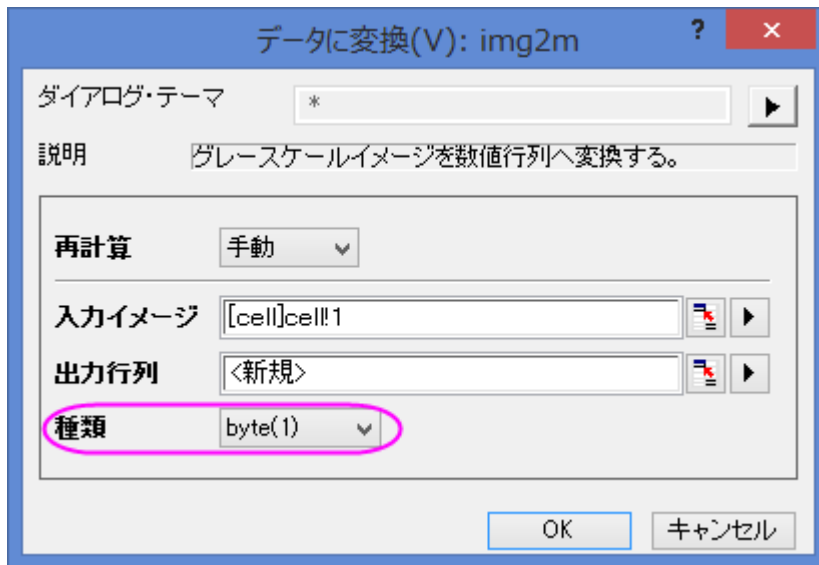
ステップ

2D FFT

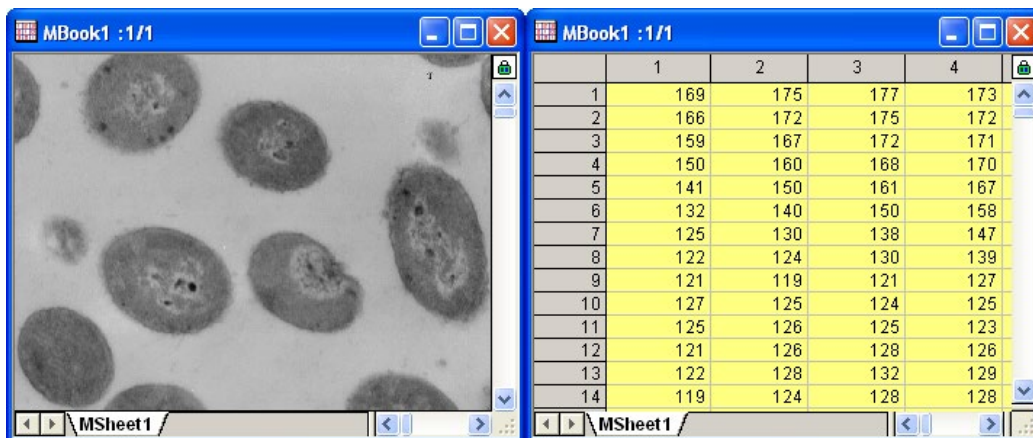
1. 新しい行列ブックを用意し、メインメニューから**データ:インポート:イメージファイル**を行列へインポートを選択し、**<Origin のインストールフォルダ>\Samples\Image Processing and Analysis\cell.jpg** を選択し、インポートします。



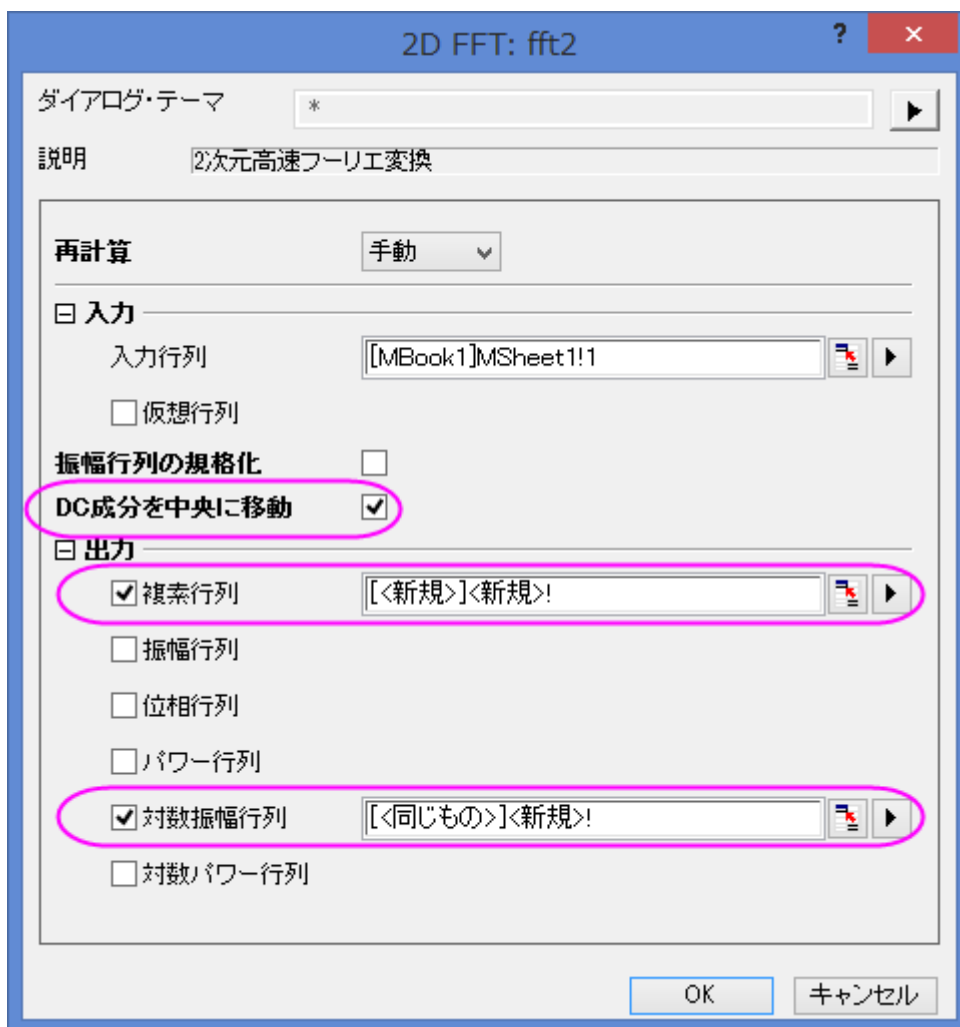
2. Origin はイメージデータを直接解析できないので、画像を行列データに変更する必要があります。そのためには、メニューの**イメージ:変換:データに変換**を選択し、**データに変換:img2m** ダイアログを開きます。種類を **byte(1)** にします。



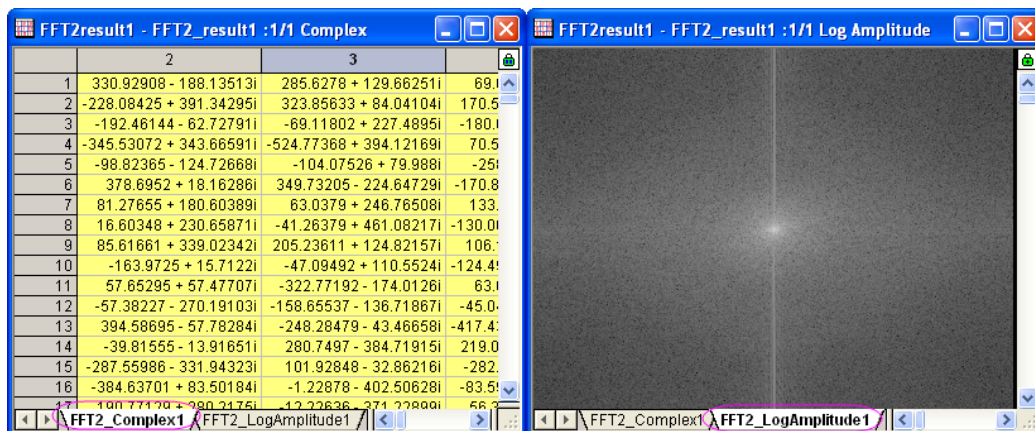
3. **OK** をクリックして変換を終了します。結果は下図のようになります。メニューから**表示:データモード**または**表示:イメージモード**を選択して表示モードの切り替えが可能です。



4. 変換した行列データをアクティブにし、メニューから**解析:信号処理:FFT:2D FFT**を選択して**2D FFT:fft2**ダイアログを開きます。**DC成分を中央に移動**にチェックを付けてDCを中央にシフトします。出力の項目では、**複素行列**と**対数振幅行列**にチェックを付けます。

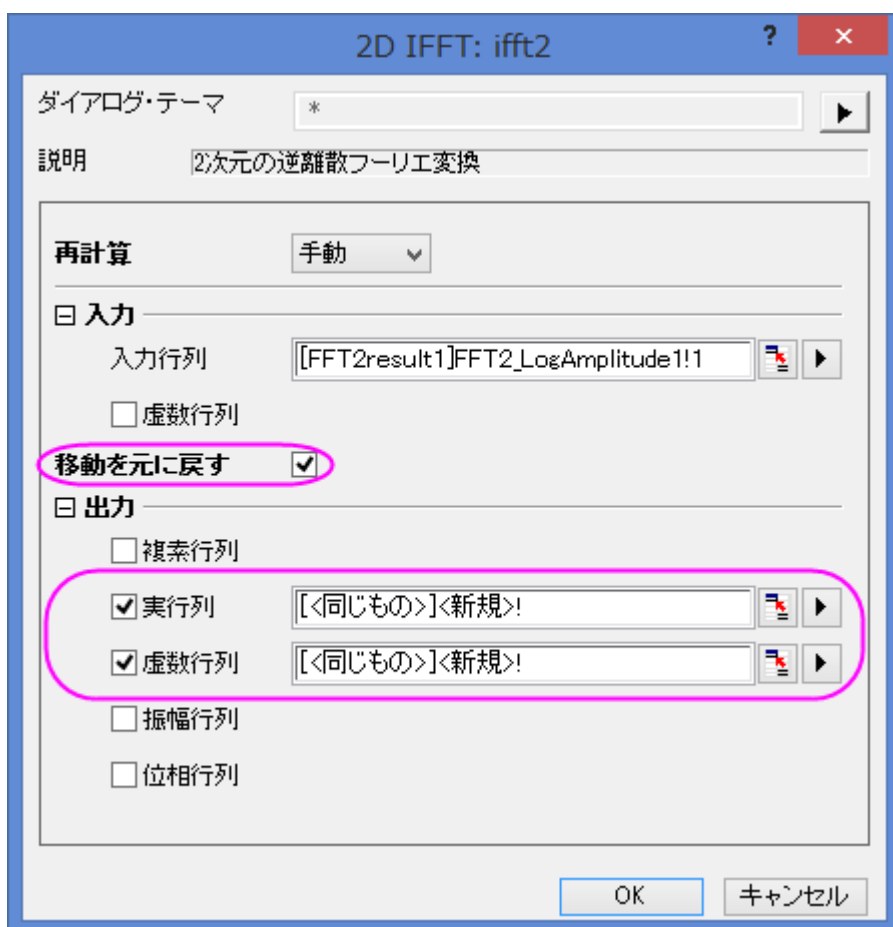


5. **OK** ボタンをクリックし、FFT 結果を生成します。1つの行列ブックに複素行列と対数振幅行列が出力されます。対数振幅行列をイメージモードにする(表示: イメージモード)と、下図のようになります。



2D IFFT

1. **2D FFT** のセクションで出力した、複素行列 (FFT2_Complex1) から操作を始めます。ウィンドウをアクティブにします。
2. メニューから**解析:信号処理:FFT:2D IFFT** を選択して **2D IFFT: ifft2** ダイアログを開きます。
3. **入力行列**は複素行列なので、ダイアログの虚数行列は必要ありません。DC はシフトされたので、**移動を元に戻す**にチェックを付けます。**出力**の項目では**実行列**と**虚数行列**にチェックを付けます。



4. **OK** ボタンをクリックすると、2つの行列データが同じ行列ブックに出力されます。

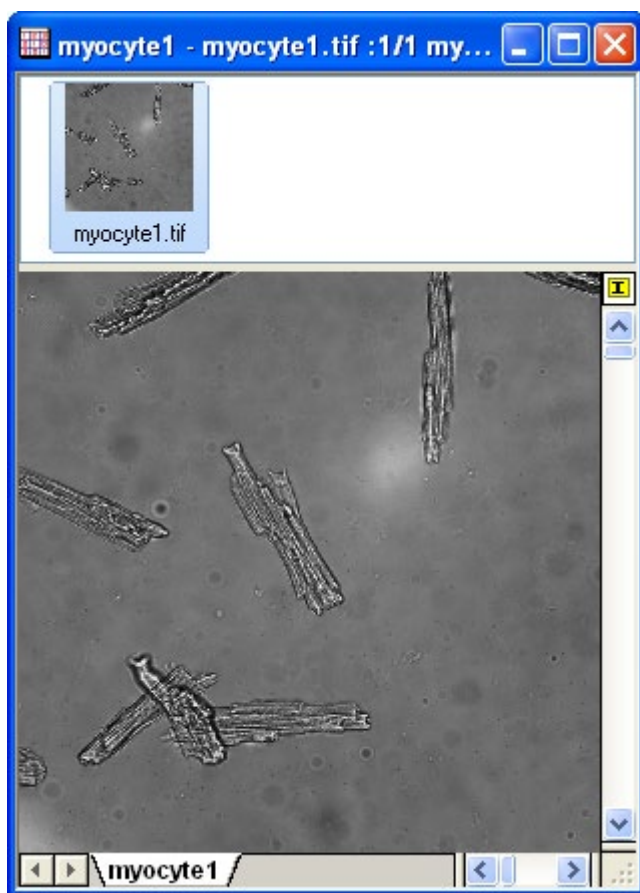
	1	2	3	4	5
1	169	175	177	173	174
2	166	172	175	172	173
3	159	167	172	171	172
4	150	160	168	170	171
5	141	150	161	167	170
6	132	140	150	158	164
7	125	130	138	147	156
8	122	124	130	139	148
9	121	119	121	127	134
10	127	125	124	125	128
11	125	126	125	123	123
12	121	126	128	126	126
13	122	128	132	129	127
14	119	124	128	128	128
15	116	118	122	126	128
16	120	119	122	126	128

5. 比べると、IFFTにより、元のデータが修復されたのがわかります。

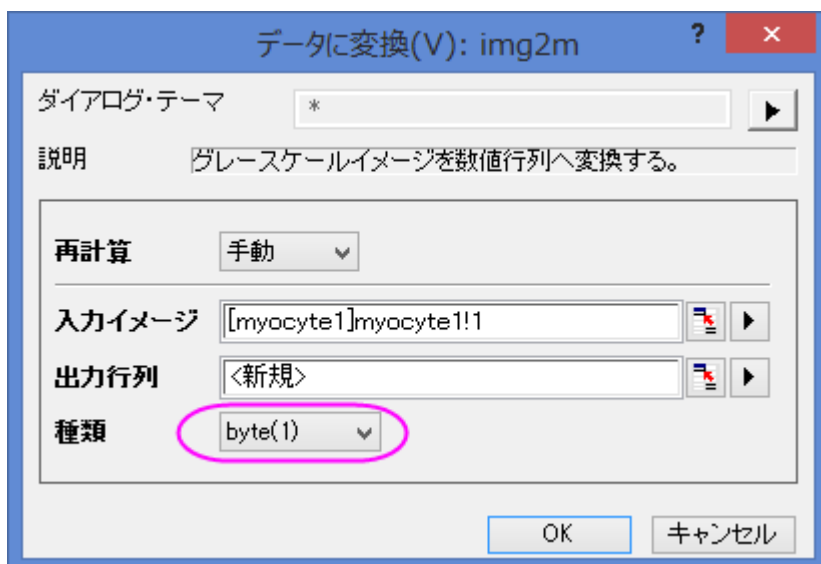
元のデータ					IFFT結果の実数部分					IFFT結果の虚数部				
	1	2	3	4		1	2	3	4		1	2	3	4
1	169	175	177	173	1	169	175	177	173	1	-1.93288E-15	5.44939E-15	-6.91026E-15	9.55
2	166	172	175	172	2	166	172	175	172	2	4.57624E-15	-8.91733E-16	-8.59599E-15	8.73
3	159	167	172	171	3	159	167	172	171	3	1.07486E-15	1.15949E-14	-3.12589E-16	1.18
4	150	160	168	170	4	150	160	168	170	4	1.95427E-15	4.24465E-15	-9.11875E-15	9.7
5	141	150	161	167	5	141	150	161	167	5	2.04847E-15	-2.64704E-16	-6.58932E-15	4.64
6	132	140	150	158	6	132	140	150	158	6	5.29929E-15	8.38949E-16	-2.18699E-15	1.05
7	125	130	138	147	7	125	130	138	147	7	2.36274E-15	3.18136E-15	-7.50514E-15	7.39
8	122	124	130	139	8	122	124	130	139	8	4.07656E-15	-6.79411E-16	-5.33021E-15	1.64
9	121	119	121	127	9	121	119	121	127	9	4.76753E-15	3.24993E-15	3.29736E-15	9.6
10	127	125	124	125	10	127	125	124	125	10	1.72977E-15	-1.15521E-15	-8.02665E-15	1.16
11	125	126	125	123	11	125	126	125	123	11	5.20158E-15	1.58656E-16	-3.0484E-15	8.05
12	121	126	128	126	12	121	126	128	126	12	8.8207E-15	9.41593E-16	1.81782E-15	1.48
13	122	128	132	129	13	122	128	132	129	13	2.49731E-15	1.76823E-15	-7.46221E-15	9.2
14	119	124	128	128	14	119	124	128	128	14	3.44932E-16	5.83679E-16	-1.56851E-15	1.46

2D FFT フィルタ

1. 新しい行列ブックを用意し、メインメニューから**データ:インポート:イメージファイル**を行列へインポートを選択し、**<Origin のインストールフォルダ>\Samples\Image Processing and Analysis\myocyte1.tif**を選択し、インポートします。

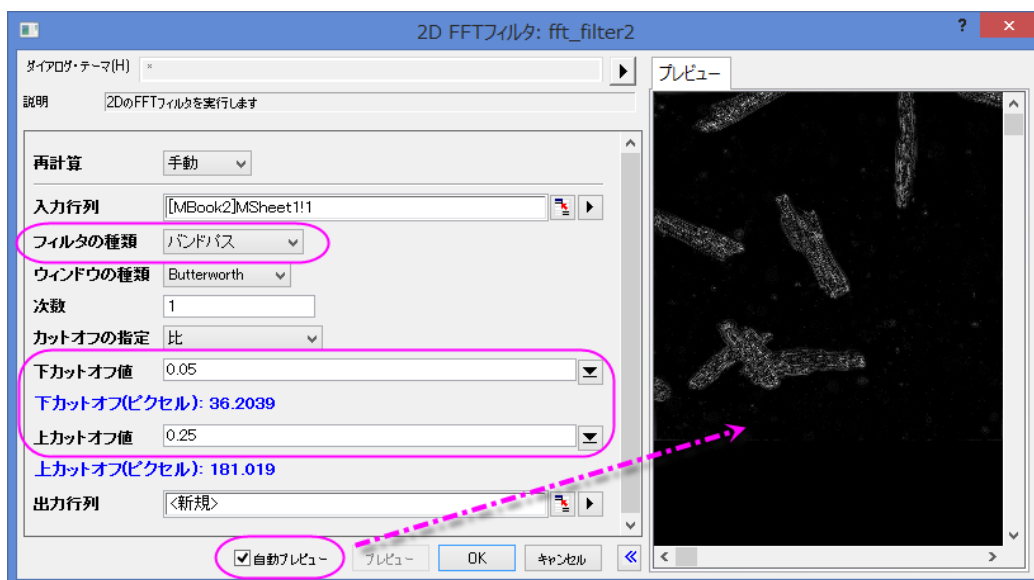


2. メニューの**イメージ:変換:データに変換**を選択し、すると、「**データに変換: img2m**」ダイアログボックスが開きます。
種類を **byte(1)**にし、**OK** ボタンをクリックします。

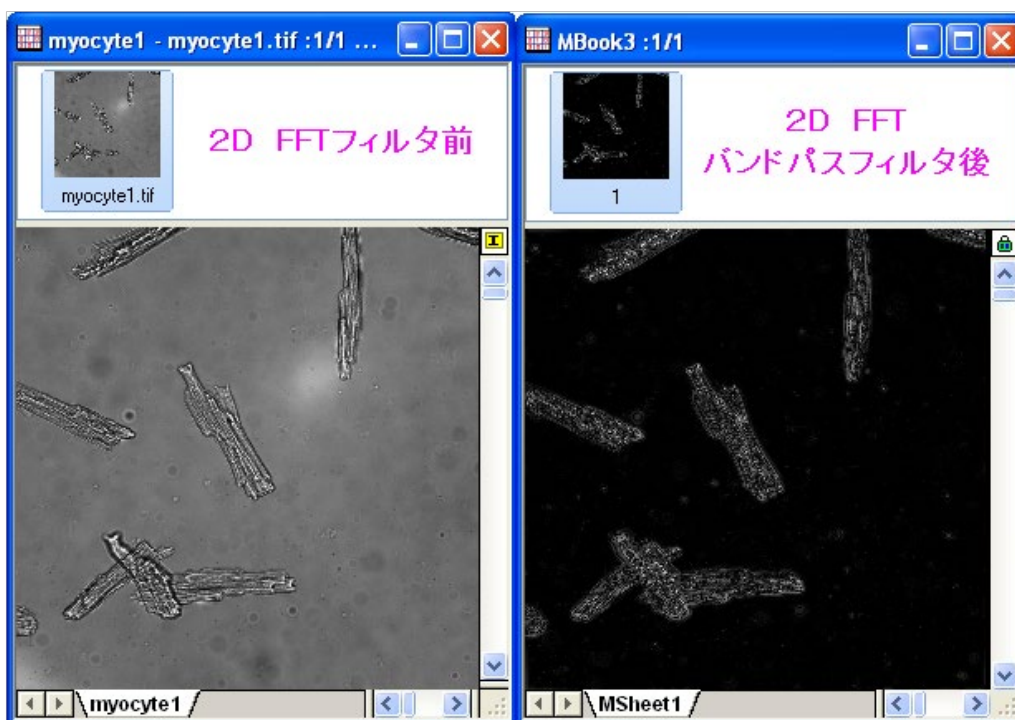


3. 変換した行列データをアクティブにし、メニューから**解析:信号処理:FFT:2D FFT フィルタ**を選択して、**2D FFT: fft_filter2** ダイアログを開きます。

4. ダイアログの自動プレビューチェックボックスにチェックを付け、右パネルで結果を表示します。フィルタ種類をバンドパスにし、下カットオフ値と上カットオフ値を 0.05 と 0.25 に設定します。他の設定項目はデフォルトのままにします。



5. OK をクリックして実行します。出力結果から、バックグラウンドのノイズが除去できたことがわかります。



4.3.7. コンボリューション

サマリー

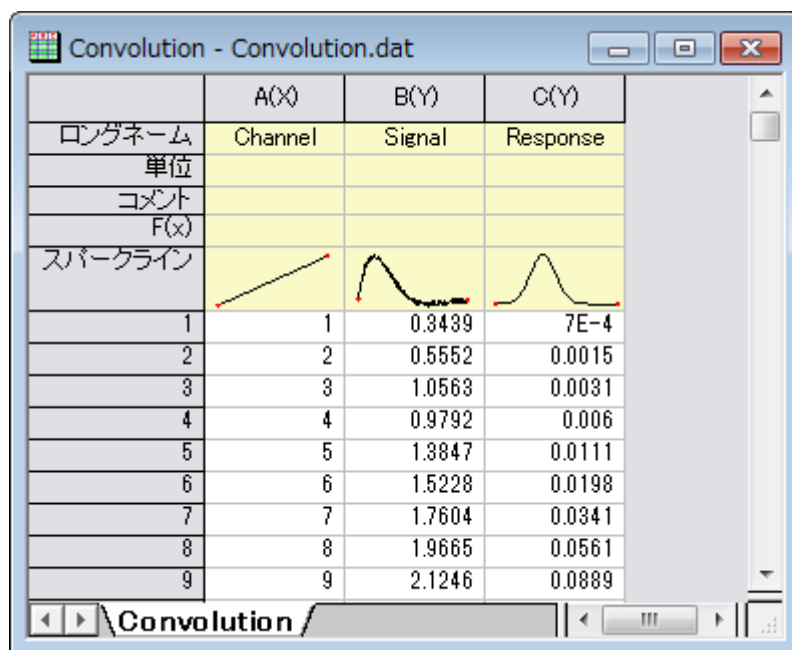
コンボリューションは信号処理で一般的に使われています。Origin は、コンボリューションを計算するために、フーリエ変換を伴うコンボリューション定理を使用しています。

学習する項目

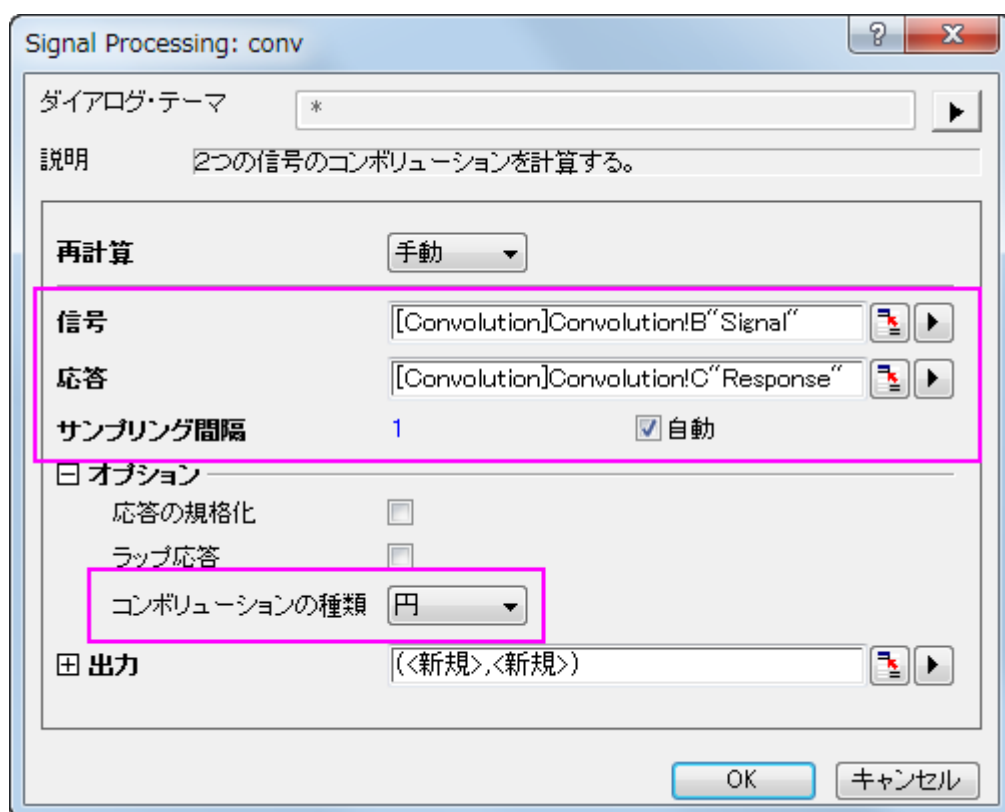
このチュートリアルでは、Origin でコンボリューションを行う方法を紹介します。

ステップ

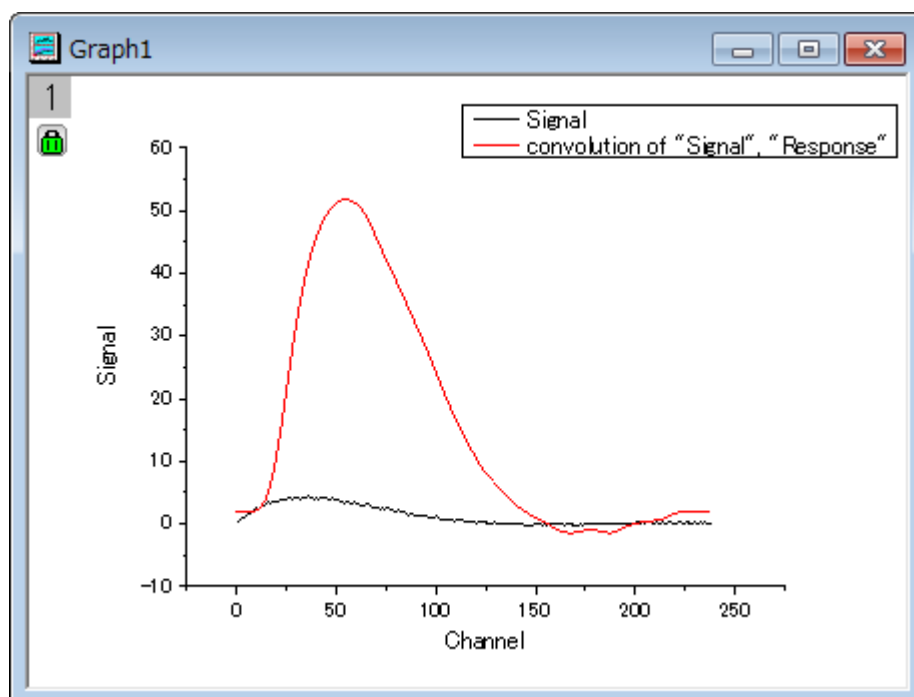
1. 新しいワークブックを用意します。
2. サンプルデータ <Origin インストールディレクトリ>\Samples\Signal Processing\Convolution.dat をインポートします。



3. B、C 列を選択して、**解析: 信号処理: コンボリューション**を選択し、**Signal Processing: conv** ダイアログを開きます。ダイアログでは、B 列が信号データ、C 列が応答データとしてラベル付けされます。サンプリング間隔は X データを参照してセットされます。
4. **オプション**の項目を開き、**コンボリューションの種類**を **円**に変更し、入力データ範囲外側のデータポイントは範囲内のデータポイントの繰り返しとします。



5. **OK** をクリックして結果を出力します。
6. ワークシートで列 B と E を選択 (Ctrl キーを押しながらクリックをして隣り合わない列を選択できます) し、メニューから **作図: 線図: 折れ線** と操作して入力信号と出力信号のグラフを作成します。





4.3.8. ウェーブレット

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 1D ウェーブレット変換](#)
 - [3.1.1 分解](#)
 - [3.1.3.2 再構成](#)
 - [3.1.3.3 Multi-Scale ウェーブレット分解](#)
 - [3.1.3.4 連続ウェーブレット変換](#)
 - [3.1.3.5 ウェーブレット変換によるノイズ除去](#)
- [4 2D ウェーブレット変換](#)
 - [3.2.4.1 2D ウェーブレット分解](#)

サマリー

ウェーブレット変換は、位相や振幅の急激な変化の信号、極大値や極小値、また関連するパラメータを分析するのに有効です。ウェーブレット変換は、時間周波数分析、特に非定常信号の分析ツールとして一般的なものになろうとしています。Originのウェーブレット変換ツールは、連続 および 離散 変換をサポートしています。Originのウェーブレット変換ツールは、**連続** および **離散** 変換をサポートしています。

学習する項目

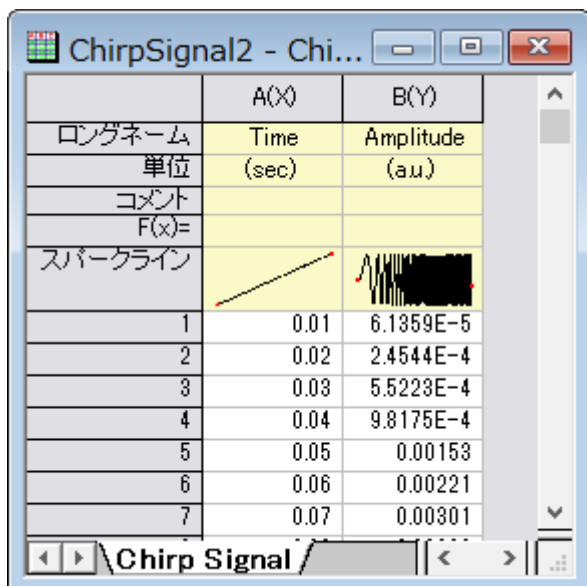
このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

1. 一次元離散ウェーブレット分解を実行し、近似係数と詳細係数から信号を再構成する
2. マルチレベル離散ウェーブレット分解を適用する
3. 連続ウェーブレット変換を実行する
4. ウェーブレット変換により信号からノイズを除去する
5. 行列データに2D離散ウェーブレットを実行し、再構成する
6. 画像を行列データに変換する
7. 複数のグラフウィンドウを1つのグラフに統合する

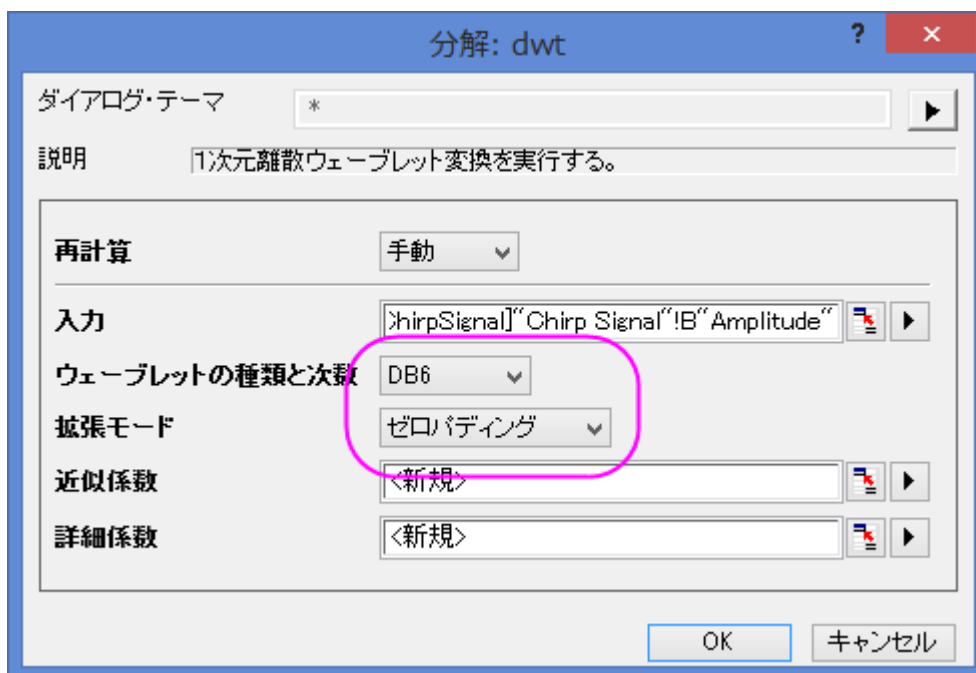
1D ウェーブレット変換

分解

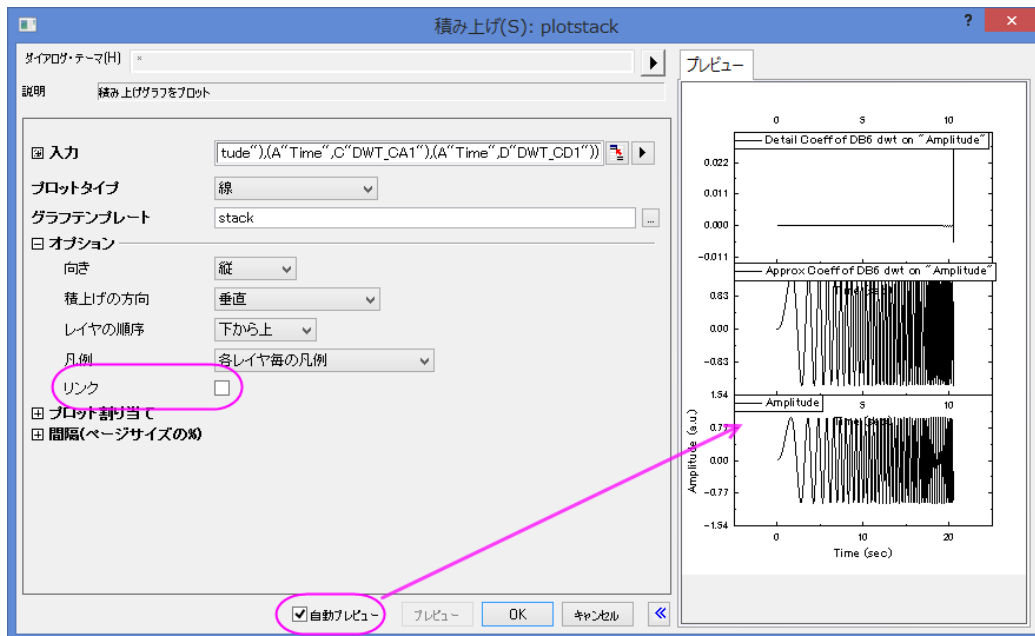
1. 新しいワークブックを作成し、メニューから**データ:ファイルからインポート:単一 ASCII ファイル...ファイル**と選択して **<Origin Installation Directory>\Samples\Signal Processing\Chirp Signal.dat** ファイルをインポートします。



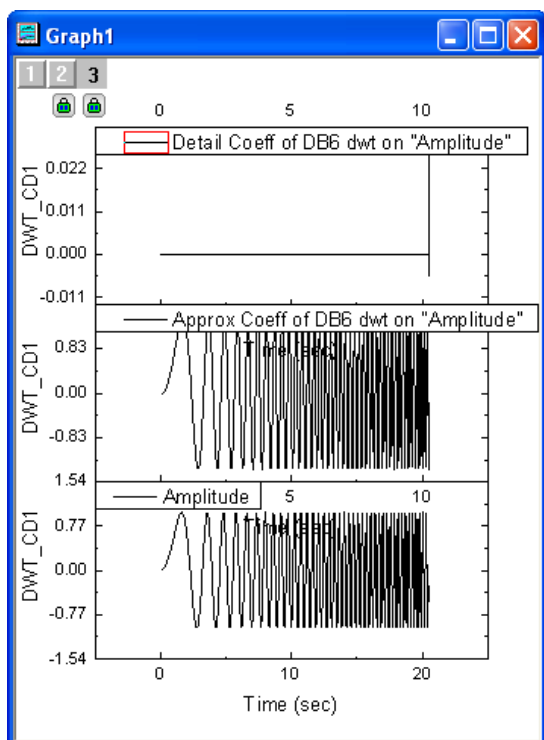
2. B 列を選択して、**解析:信号処理:ウェーブレット:分解** を選択し、**分解:dwt** ダイアログを開きます。
3. ダイアログでは、**ウェーブレットの種類と次数**に **DB6** を選択し、**拡張モード**に**ゼロパディング**を指定します。



4. OK をクリックしてダイアログを閉じ、近似係数と詳細係数を出力します。
5. B、C、D 列(C 列と D 列は近似係数と詳細係数をそれぞれ含んでいる必要があります)を選択し、メニューから**作図: 基本の 2D グラフ: 積み上げ...**を選択して**積み上げ: plotstack** ダイアログボックスを開きます。
6. 開いたダイアログで、**オプション**の項目の**リンク**のチェックを外します。ダイアログの**自動プレビュー**チェックボックスにチェックを付け、右パネルでプレビューできるようにします。



7. **OK** をクリックして、ダイアログボックスを閉じ、積み上げグラフを作成します。



Note:2(3、4...)次元の離散ウェーブレット分解を行うには、ステップ2から4の操作を、近似係数(ここではC列)に対して繰り返します。また、OriginProでのみ利用可能なマルチスケールウェーブレット分解は以下のセクションで実行します。

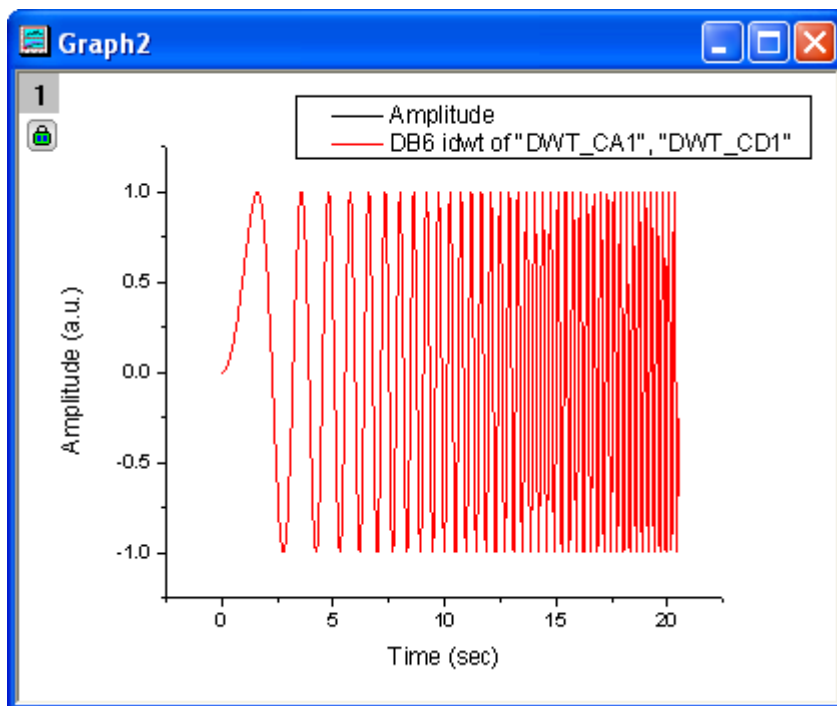
再構成

再構成は、分解の逆演算で、このサンプルでは、上記のセクションで生成された結果から再構成を行います。

1. 上のセクションで得られた結果のC、D列(近似係数と詳細係数)を選択します。
2. メニューから**解析:信号処理:ウェーブレット:再構成**を選択して**再構成:idwt**ダイアログを開きます。
3. 信号の再構成を実行するには、**ウェーブレットの種類**や**境界**を同じものに設定する必要があるため、**DB6**と**ゼロパディング**を選択します。



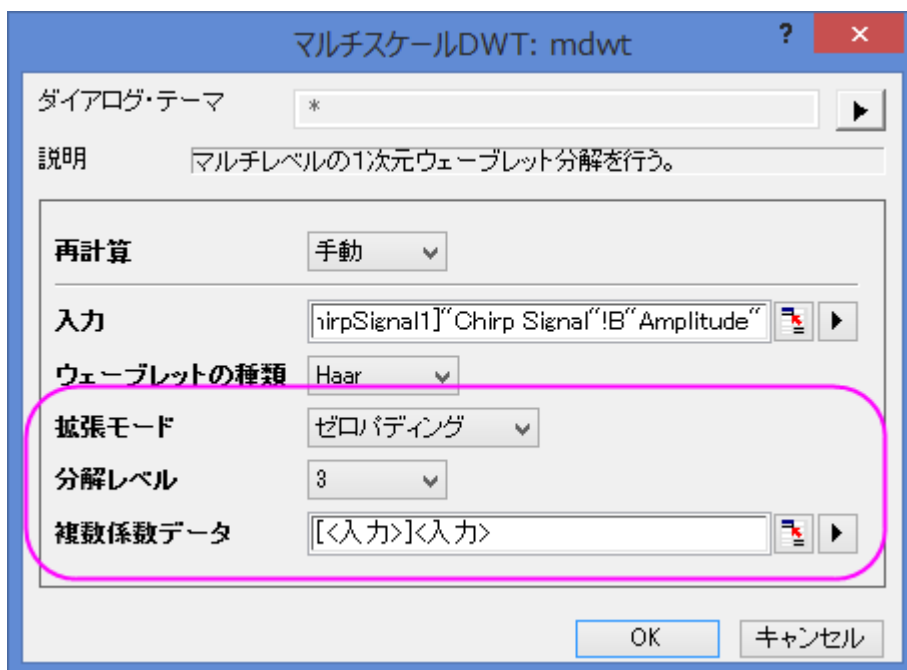
4. **OK** ボタンをクリックすると、再構成された信号データが列 E に出力されます。
5. CTRL キーを押しながら列 B と列 E を選択します。メニューから**作図:基本の 2D グラフ:折れ線**を選択してこれら 2 列のグラフを作成します。



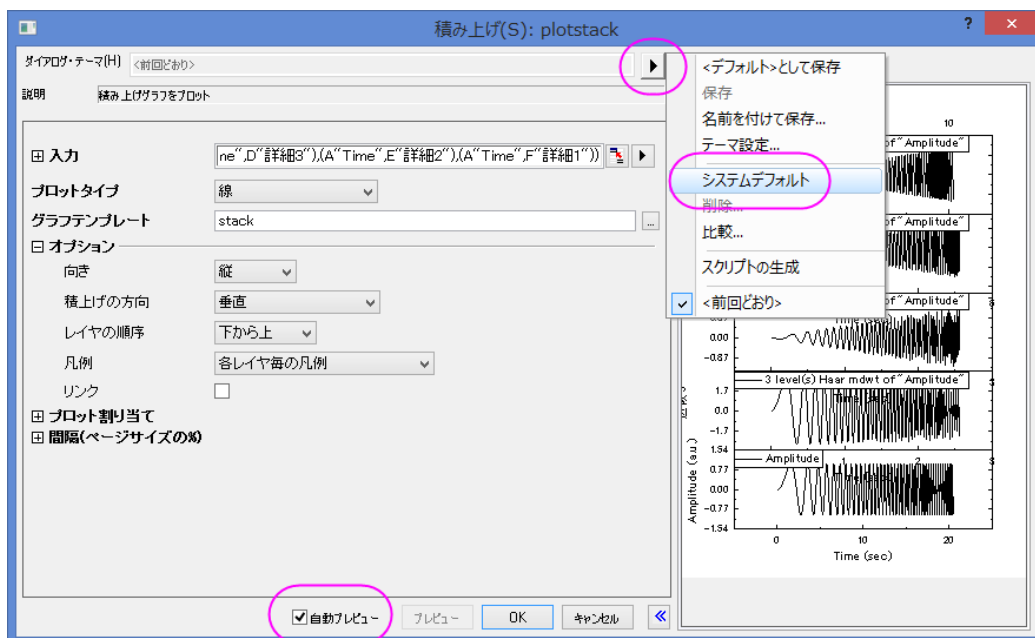
6. 作図されたグラフから、元の信号と再構成された信号データが重なり合っていることがわかります。

Multi-Scale ウェーブレット分解

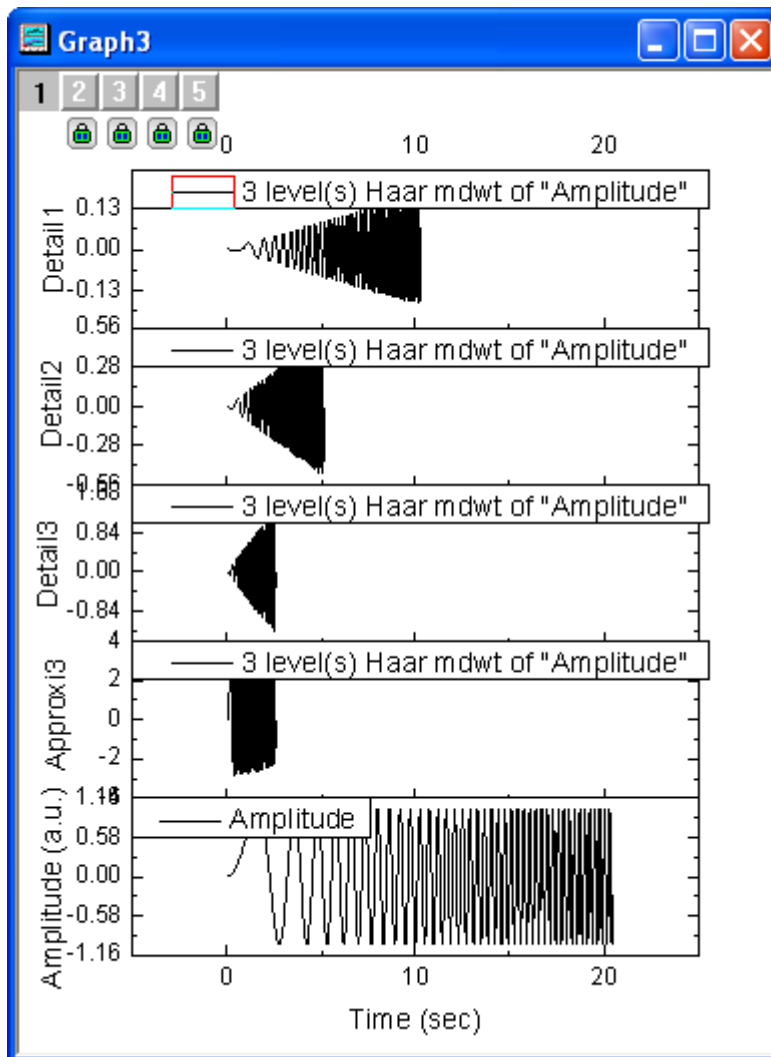
1. 新しいワークブックを作成し、上述の分解セクションで使用したデータと同じものをインポートします。
2. B 列を選択して、解析:信号処理:ウェーブレット:マルチスケール DWT を選択し、マルチスケール DWT:mdwt ダイアログを開きます。
3. 拡張モードをゼロパディングにし、分解レベルを 3 に変更します。複数係数データのコンテキストメニューから、[<入力>]<入力>を選択します。



4. **OK** をクリックして、レベル 3 の離散ウェーブレットを実行すると、係数が元データと同じワークシートに格納されます。
5. ワークシート内の全ての列を選択し、メニューから作図:基本の 2D グラフ:積み上げ...を選択して積み上げ: **plotstack** ダイアログボックスを開きます。ダイアログテーマの右にある矢印ボタンをクリックし、システムデフォルトを選択します。グラフをプレビューするために、ダイアログの下側にある、自動プレビューにチェックを付けます。

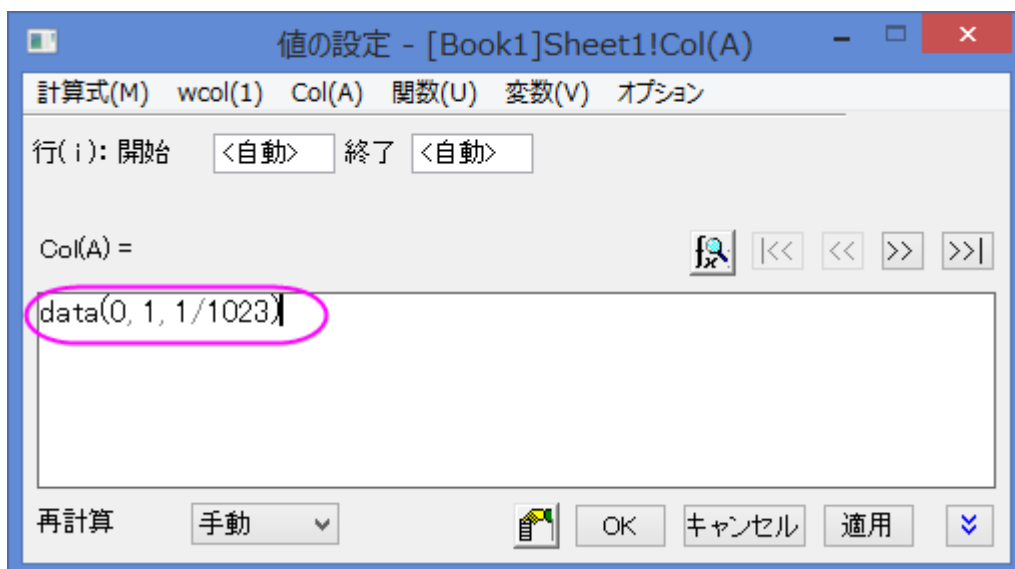


6. **OK** をクリックします。以下の結果グラフが作図されます。

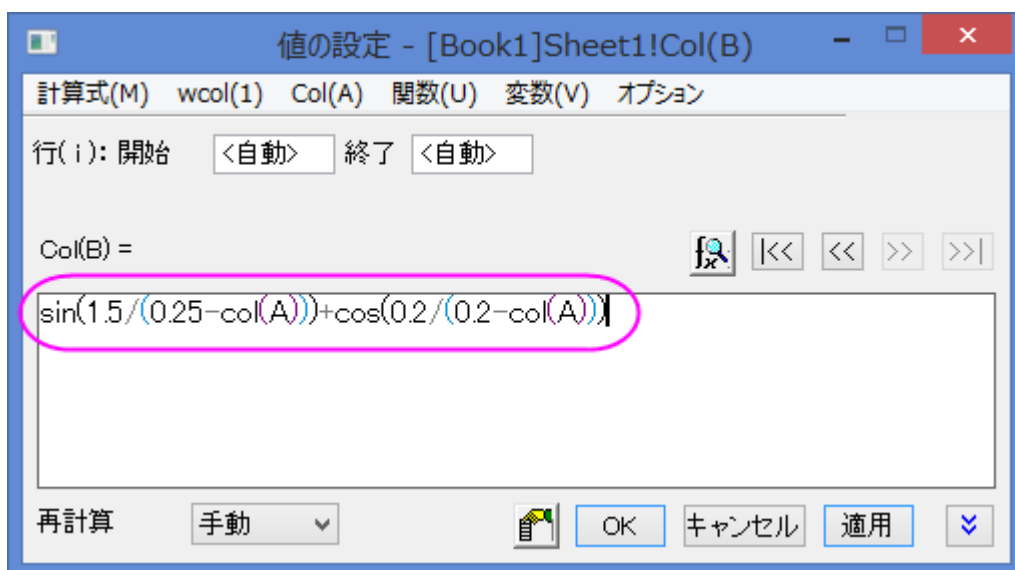


連続ウェーブレット変換

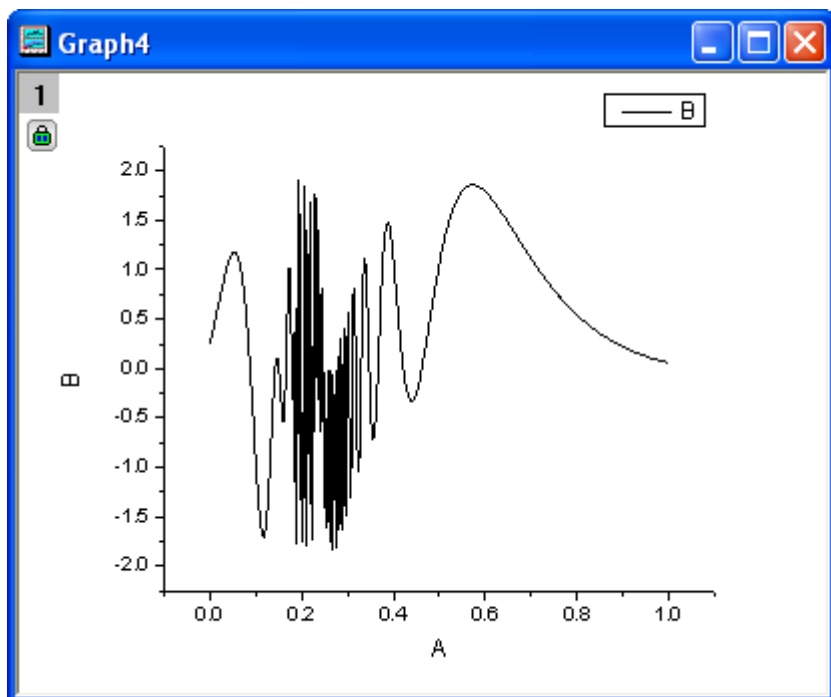
1. 空の A 列と B 列を持つ新しいワークシートを作成します。
2. 列 A を選択して右クリックし、ショートカットメニューから**列値の設定**を選択し、**値の設定**ダイアログボックスを開きます。テキストボックスに"data(0, 1, 1/1023)" と入力し、**適用**をクリックします。A 列に値が入力されます。



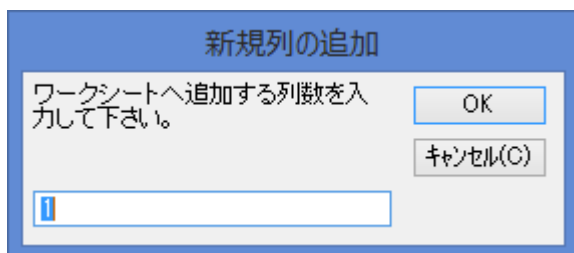
- >>ボタンをクリックして、B列の値の設定を行います。テキストボックスに、" $\sin(1.5/(0.25-\text{col}(A)))+\cos(0.2/(0.2-\text{col}(A)))$ " と入力して **OK** ボタンをクリックします。



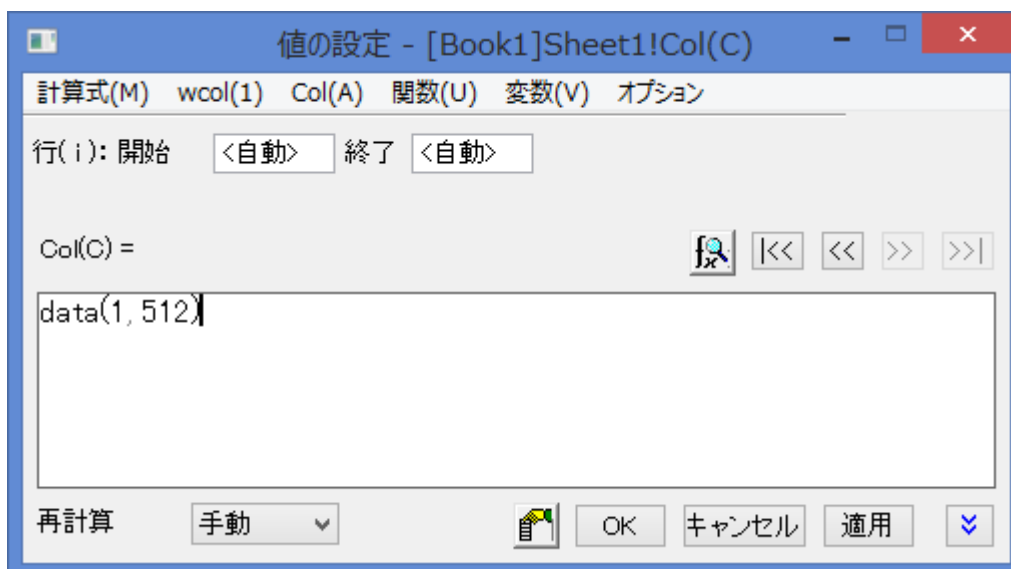
- 生成したデータを確認するためにグラフを作図すると下図のようになります。列 B が選択された状態で、メニューから **作図: 基本の 2D グラフ: 折れ線** を選択します。



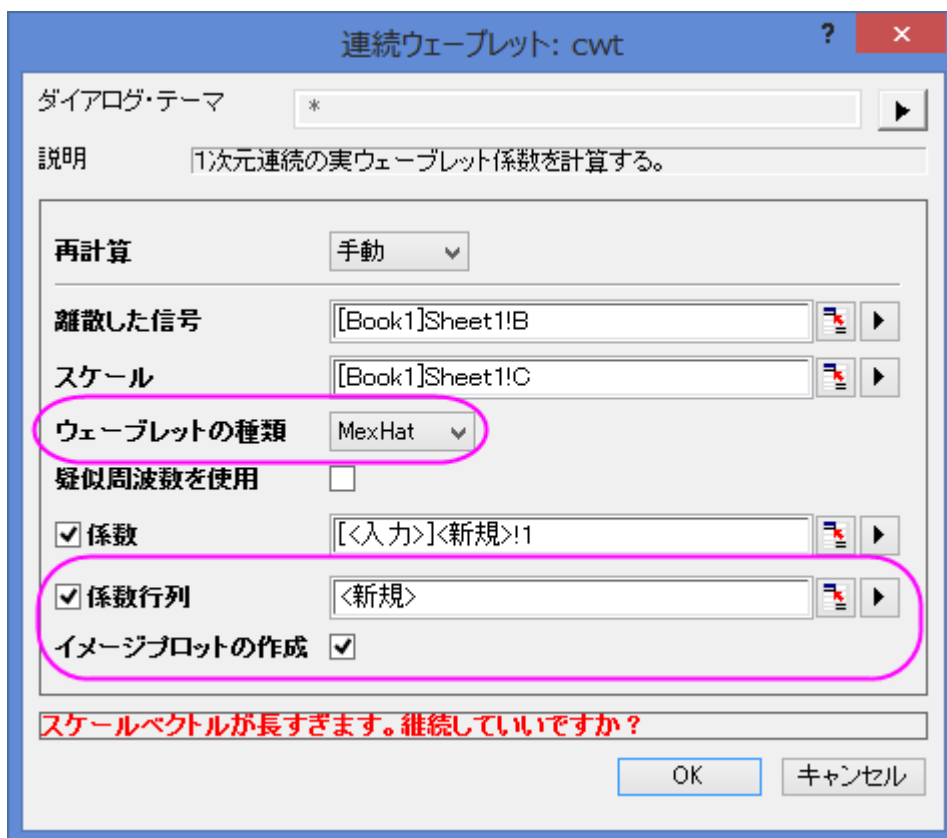
5. ワークシートをアクティブにして、メニューの**列:新規列の追加...**を選択してワークシートに新しい列を追加します。開いたダイアログで、デフォルトの 1 のまま、**OK** ボタンをクリックします。



6. 新たな列 (C 列) がワークシートに追加されました。この C 列を選択し、ショートカットメニューから、**列値の設定**を選択します。テキストボックスに、スクリプト "data(1, 512)" を入力して **OK** ボタンをクリックします。

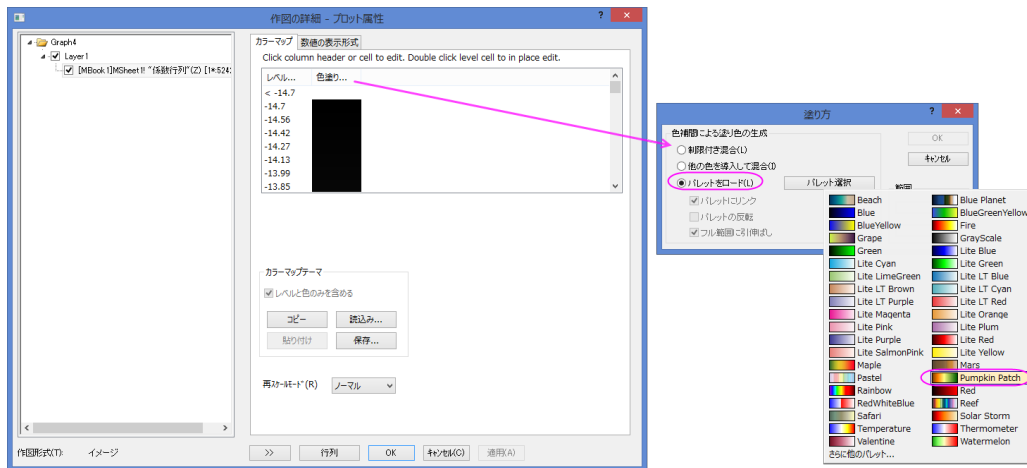


7. 列 B と列 C を選択し、メニューから **解析: 信号処理: ウェーブレット: 連続ウェーブレット** を選択して **連続ウェーブレット: cwt** ダイアログボックスを開きます。
8. ダイアログで、**ウェーブレットの種類** を **MexHat** にし、**係数行列** にチェックをつけます。

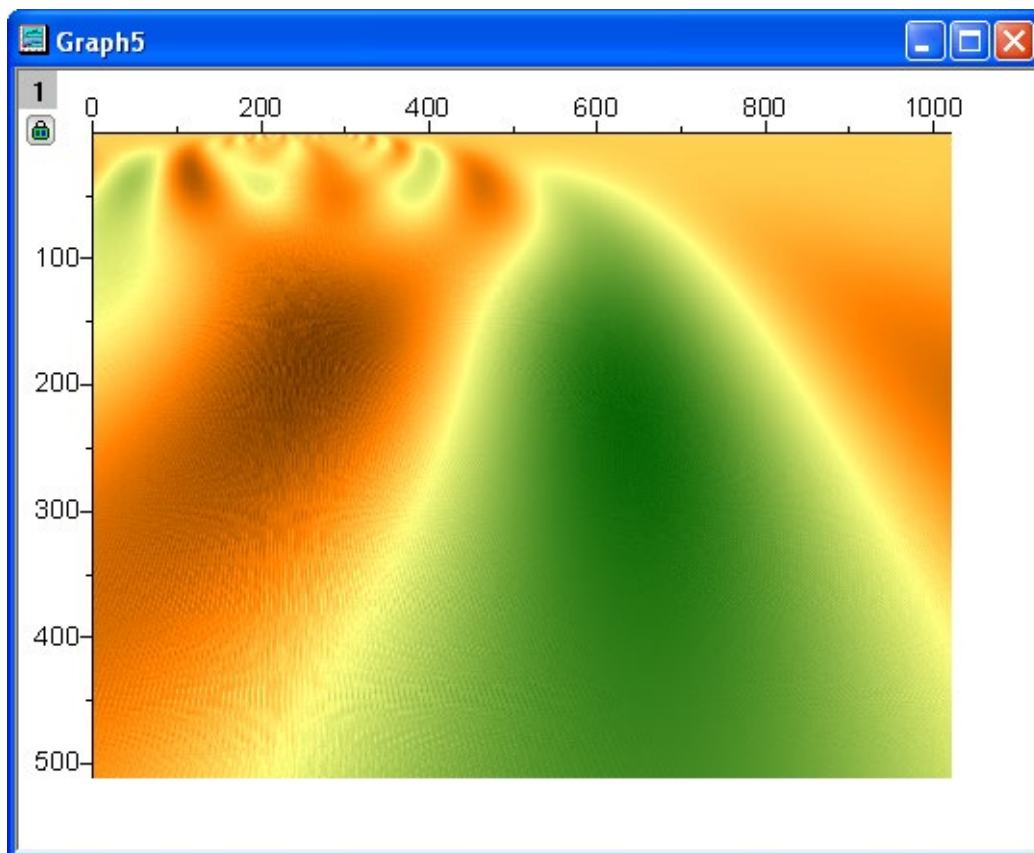


9. **OK** ボタンをクリックして、ダイアログを閉じます。

10. 新しいワークシートと行列に係数が出力され、さらに等高線図も作図されます。グラフをダブルクリックして、**作図の詳細ダイアログ**を開きます。右パネルの**カラーマップ**タブで、色塗りヘッダをクリックして塗り方ダイアログを開きます。パレットをロードを選択して、**パレットを選択**ボタンを押し、**Pumpkin Patch**を選択します。Ok をクリックし、プロットの**詳細ダイアログ**を開きます。

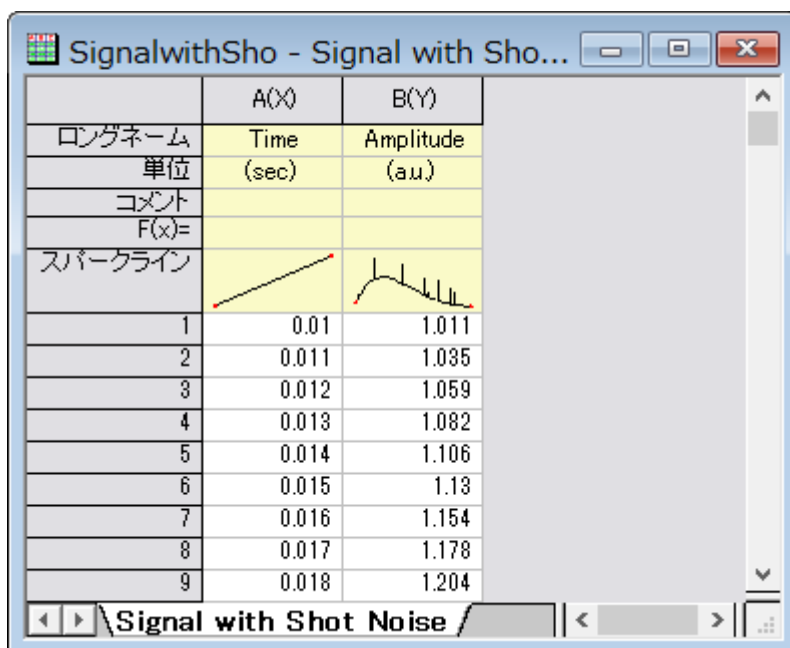


11. OK をクリックするとグラフの配色が変更され、グラフは下図のようになります。

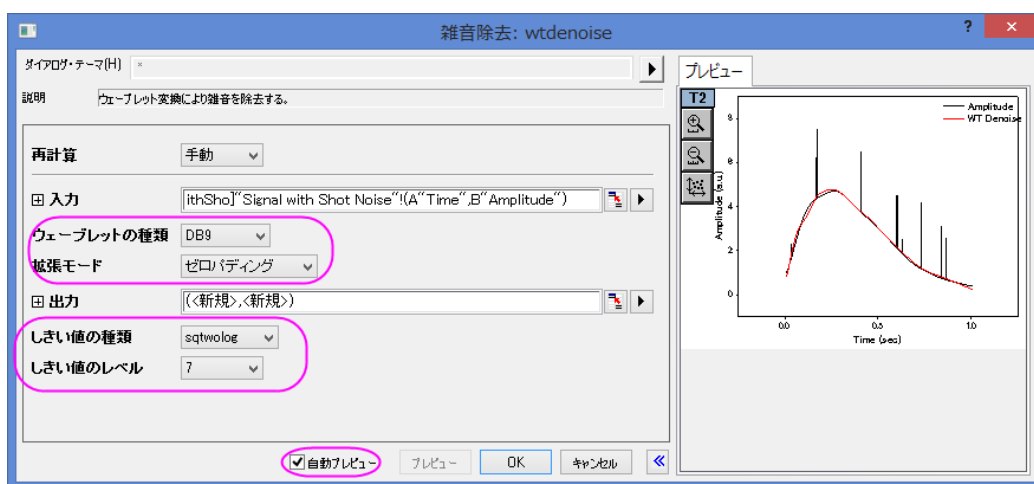


ウェーブレット変換によるノイズ除去

1. 新しいワークブックを用意して、メニューから **データ:ファイルからインポート:単一 ASCII ファイル...** を選択します。
<Origin Installation Directory>\Samples\Signal Processing\Signal with Shot Noise.dat をインポートします。



2. 上図のようにスパークラインが表示され、この信号データにはノイズが含まれていることが分かります。B 列を選択して、**解析:信号処理:ウェーブレット:雑音除去** を選択し、**雑音除去:wtdennoise** ダイアログを開きます。
3. ダイアログの**自動プレビュー**チェックボックスにチェックを付け、右パネルでプレビューできるようにします。**ウェーブレットの種類**を **DB9** にし、**拡張モード**を**ゼロパディング**に、**しきい値の種類**を **sqrtwolog** にして、**しきい値のレベル**を **7** に設定します。



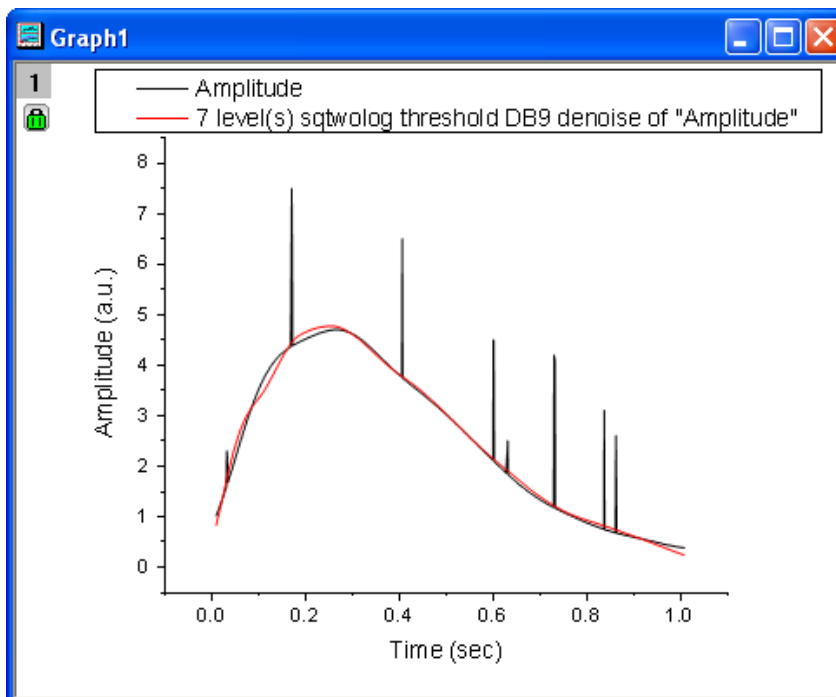
4. OK ボタンをクリックして、信号からノイズを除去し、ワークシートの C、D 列に結果が出力されます。

SignalwithSho - Signal with Shot Noise...

	A(X1)	B(Y1)	C(X2)	D(Y2)
ロングネーム	Time	Amplitude	Denoised X	Denoised Y
単位	(sec)	(a.u.)		
コメント				7 level(s) sqrtwolog threshold DB9 denoise of "Amplitude"
F(x)=				
スパークライン				
1	0.01	1.011	0.01	0.82603
2	0.011	1.035	0.011	0.86289
3	0.012	1.059	0.012	0.90025
4	0.013	1.082	0.013	0.93808
5	0.014	1.106	0.014	0.97636
6	0.015	1.13	0.015	1.01507
7	0.016	1.154	0.016	1.05418
8	0.017	1.178	0.017	1.09366
9	0.018	1.204	0.018	1.13347
10	0.019	1.23	0.019	1.17358
11	0.02	1.256	0.02	1.21396
12	0.021	1.282	0.021	1.25457

Signal with Shot Noise

5. ワークシートのすべての列を選択して、メニューから**作図:基本の 2D グラフ:折れ線**と選択して元データと結果データのグラフを作図します。グラフは以下のようになり、ノイズが除去されたことがわかります。



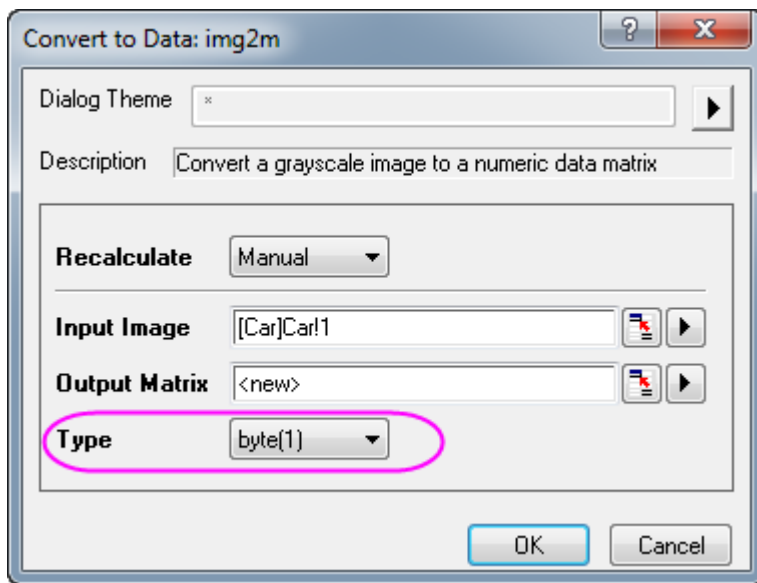
2D ウェーブレット変換

2D ウェーブレット分解

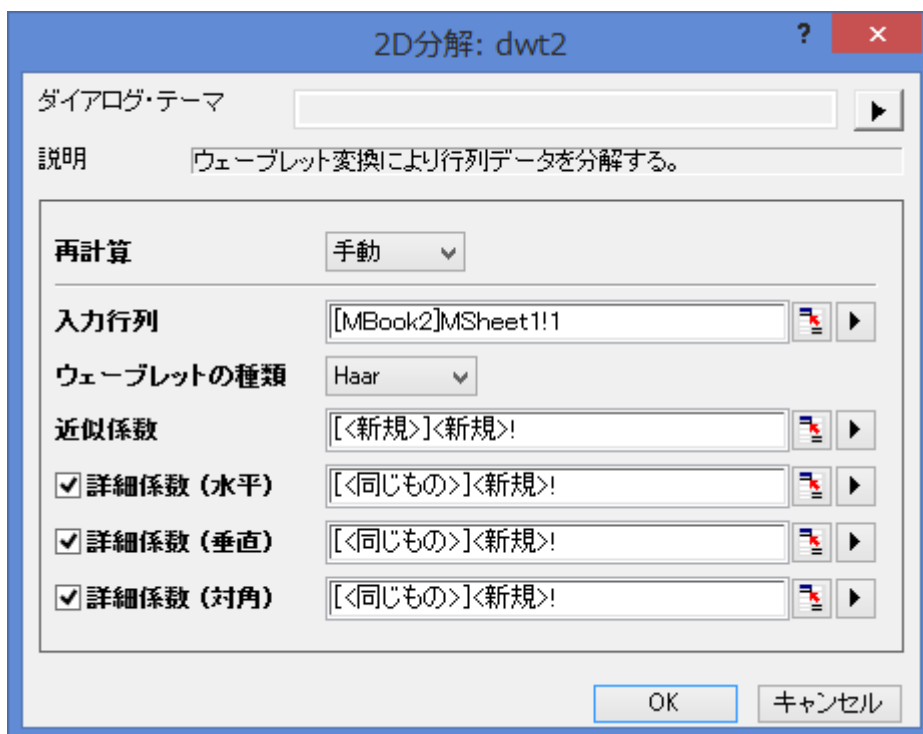
1. 新しい行列ブックを用意します。新しい行列ブックを用意し、メインメニューから**データ:ファイルからインポート:イメージファイル**を行列へインポートを選択し、<Origin のインストールフォルダ>\Samples\Image Processing and Analysis\myocyte1.tif を選択し、インポートします。



2. 最初に、イメージをデータに変更する必要があります。そのためには、メニューの**イメージ:変換:データに変換**を選択します。**データに変換:img2m** ダイアログを開きます。**種類**を **byte(1)**にします。



3. OK をクリックして、行列データの変換を実行します。
4. 変換された行列データをアクティブにし、メニューから**解析:信号処理:ウェーブレット:2D 分解**を選択して **2D 分解: dwt2** ダイアログを開きます。



5. 初期設定のまま、**OK** ボタンをクリックし、行列データに対して 2D ウェーブレット分解を実行します。4 つのシート (CA, CH, CV, and CD) をもつブックが生成されます。CA, CH, CV, CD は 近似係数、詳細係数 (水平)、詳細係数 (垂直)、詳細係数 (対角) に対応しています。メニューの**表示:イメージモード**を選択して表示モードをイメージに変更できます。



6. Caシートをアクティブにして、メニューから作図:等高線図:イメージプロットを選択してイメージプロットを作成します。
作図:等高線図:イメージプロットを選択してイメージプロットを作成します。同様に、CH,CV,CDシートについてもグラフを作成します。
7. グラフをダブルクリックして開く作図の詳細で、左パネルで Layer1 をアクティブにし、右パネルのレイヤの大きさ・描画スピードタブを開き、行列データ、次元あたりの最大ポイント数のチェックを外します。OK ボタンをクリックします。そして、グラフの軸関連オブジェクト(軸ラベルを含む)を選択し、Delete キーをおして削除します。全てのグラフでこの操作を行います。



4.3.9. コヒーレンスと相関

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 コヒーレンス](#)
- [4 1D 相関](#)

サマリー

コヒーレンスは、2つの信号が似たような周波数成分が含んでいるかどうかテストすることによって、線形依存性の度合いを測定します。2つの信号を周波数で完全に一致していると考えられる場合には、コヒーレンスの大きさは1になります。そうでなく、完全に無関係の場合は0となります。

相関はもうひとつの2つの信号間の関係指標です。相関係数は、相関の強さを評価するために使用されます。計算された相関係数が大きい場合には、2つの信号の類似度は高く、小さな場合は、2つの信号はほとんどまたは全く線形関係がないことを意味しています。

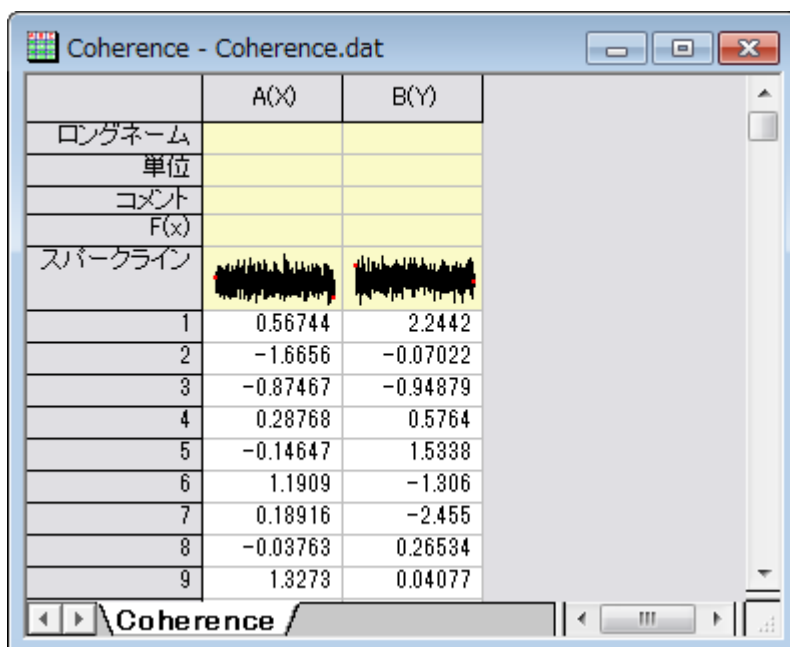
学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

1. コヒーレンスを計算し、2つの信号で線形依存の最も高い周波数を見つける
2. 相関を計算し、データセットを変換するためのラグを見つける

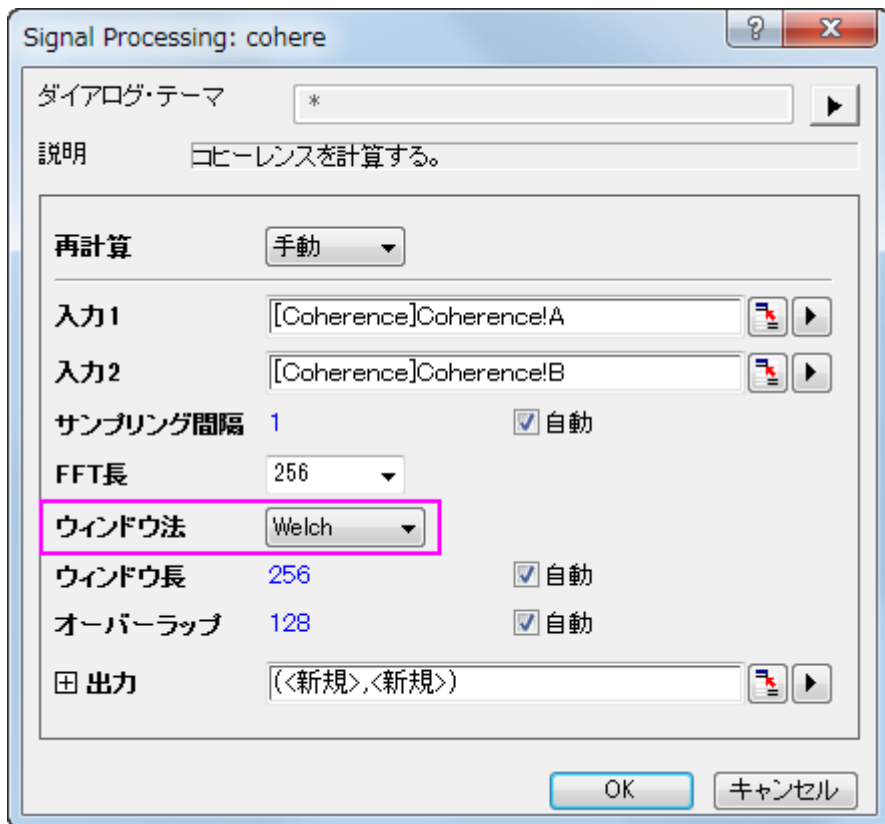
コヒーレンス

1. 新しいワークブックを用意します。
2. メニューの**ファイル:インポート:単一 ASCII インポート**を選択し、<Origin インストールフォルダ>\Samples\Signal Processing\Coherence.dat ファイルをインポートします。

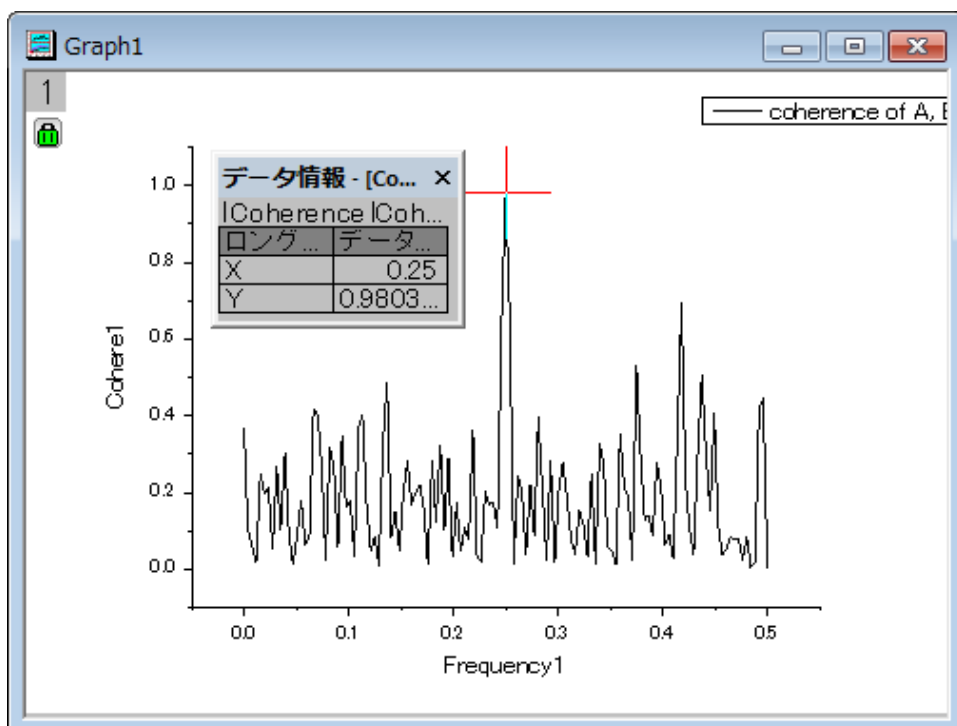


3. 列 A を選択し、右クリックしてショートカットメニューから**列 XY 属性の設定: Y**を選択します。これにより、列 A の属性を Y データとします。
4. 2つの列を選択して、**解析:信号処理:コヒーレンス**を選択します。Signal Processing: cohere ダイアログを開きます

5. ウィンドウ法を Welch に変更し、OK ボタンをクリックしてコヒーレンスを計算します。



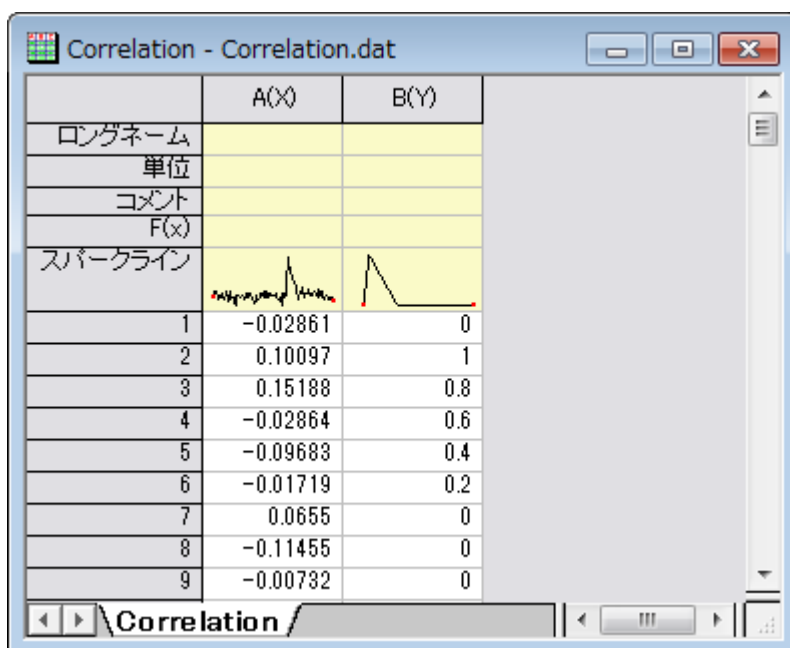
6. ワークシートに 2 列追加されます。これら 2 つの列を選択し、**作図:線図:折れ線**を選択して結果から周波数に対するコヒーレンスの状況を作図します。



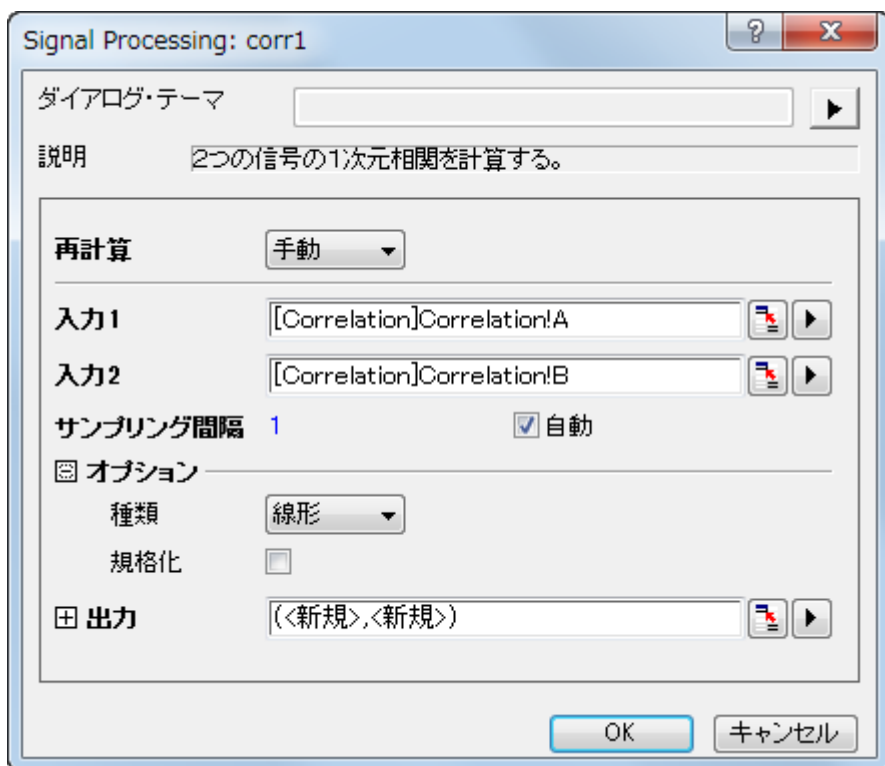
7. **プロット操作・オブジェクト作成ツールバーからデータリーダー**を選択し、一番高いピークの値を調べます。上図のように、周波数が 0.25 の時、一番強いピークが出るのがわかります。そして、このコヒーレンスのピークの大きさは、この周波数で 2 つの信号が強く対応するということを意味します

1D 相関

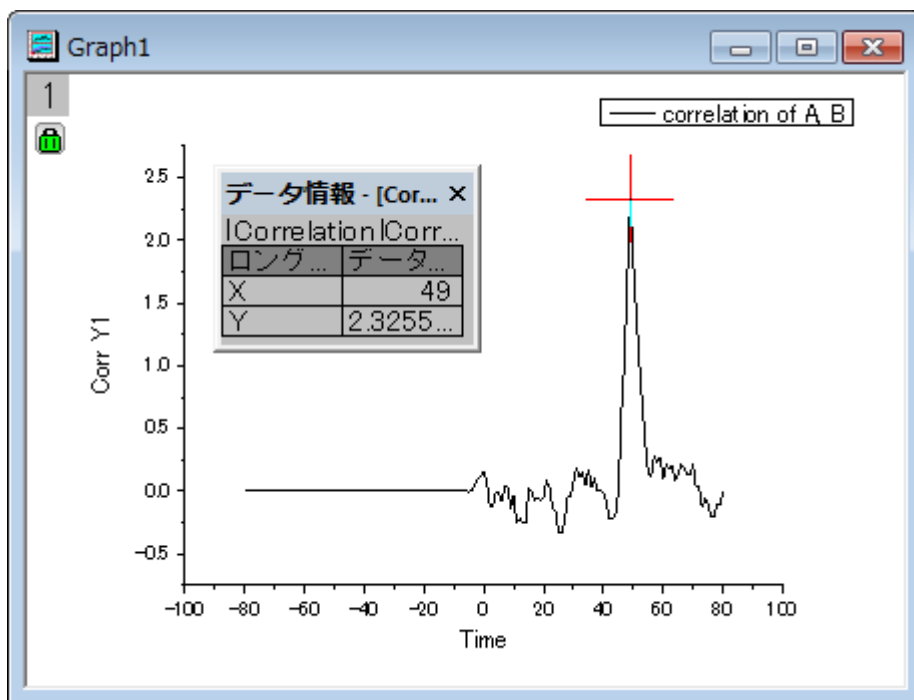
1. 新しいワークブックを用意します。
2. メニューの**ファイル:インポート:単一 ASCII インポート**を選択し、<Origin インストールフォルダ>\Samples\Signal Processing\Correlation.dat ファイルをインポートします。



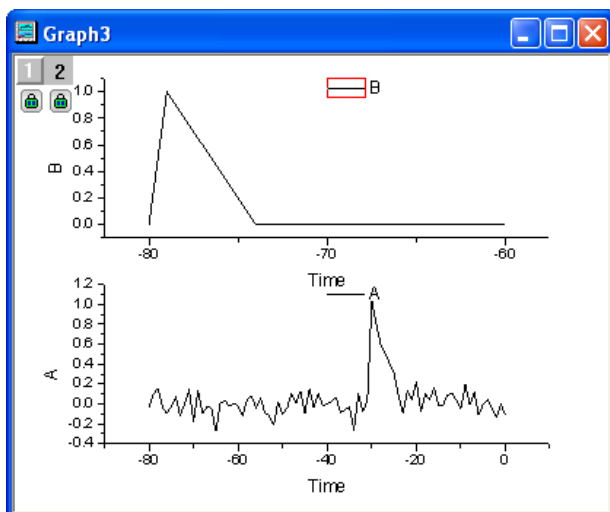
3. A 列を選択し、右クリックしてコンテキストメニューを開きます。**列 XY 属性の設定**:Y 列と選択して、この列の属性を Y 列にします。
4. 2 つの列を選択して、**解析:信号処理:相関**を選択します。**Signal Processing: cohere** ダイアログを開きます。デフォルト設定のまま使用します。



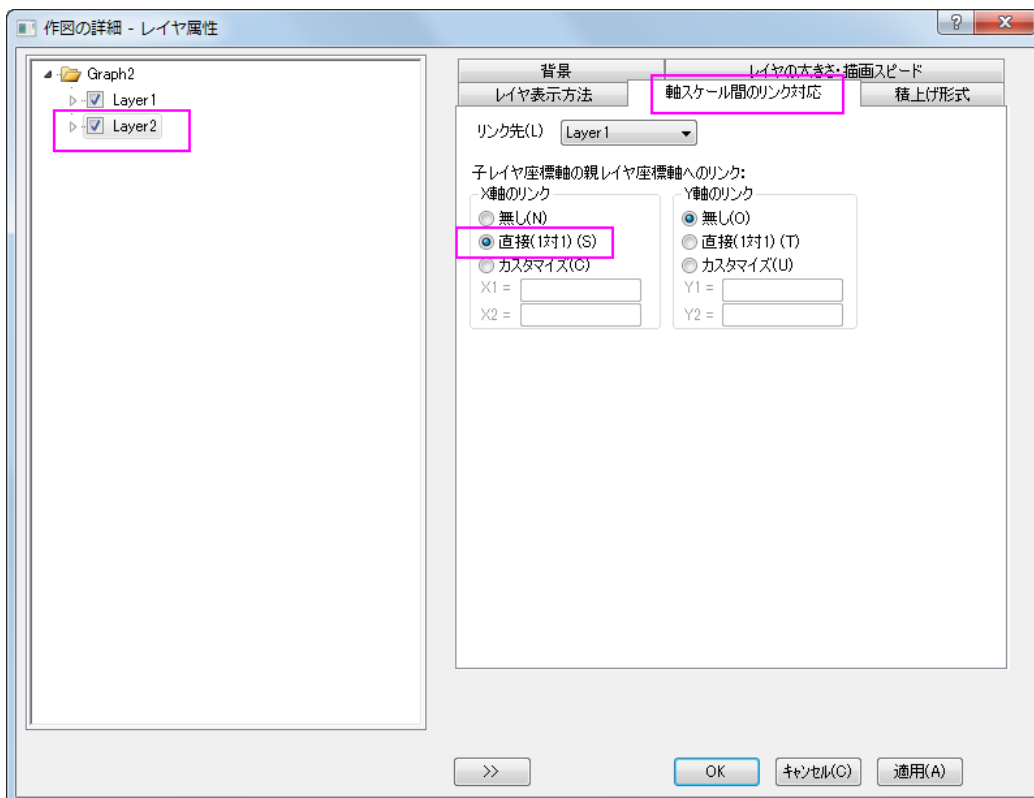
5. **OK** ボタンをクリックして2つの信号の相関を計算します。
6. ワークシートに、相関の結果が時間差列と共に出力されます。D列を選択し、**作図:線図:折れ線**を選択して結果からグラフを作図します。



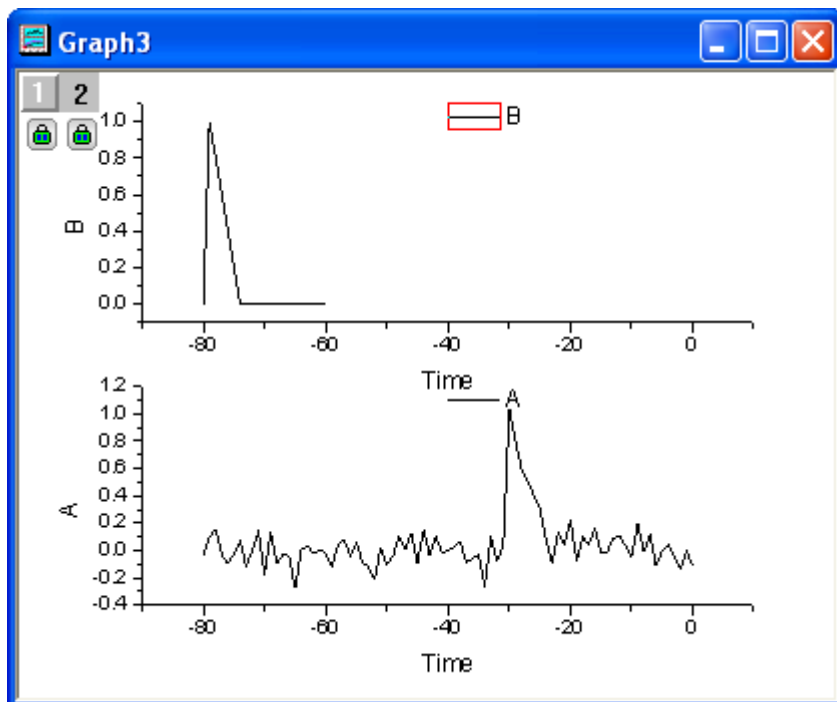
7. 上図のように、データリーダーを使用して強いピークの位置をみると、Time=49 であることがわかります。これにより、これら 2 つの信号を位置合わせするには、2 つ目のデータセットを 49 単位変換する必要があることがわかります。
8. ワークシートに戻り、A 列と B 列を選択します。メニューの作図: 複数パネル: 垂直二区分を選択して 2 つの信号データから 2 つのレイヤを持つグラフを作成します。



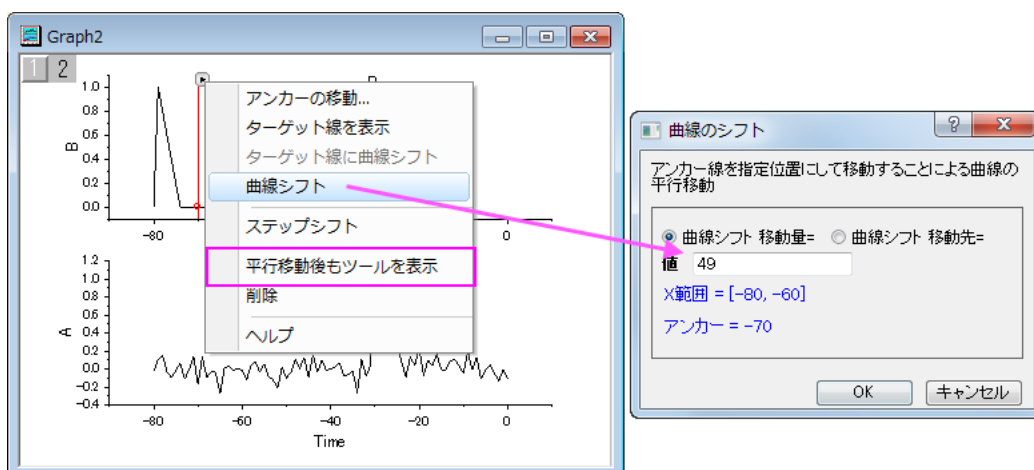
9. 上グラフのプロット上でダブルクリックして、作図の詳細(プロット属性)ダイアログを開きます。左パネルで、Layer 2 を選択し、右パネルで軸スケール間のリンク対応タブを開きます。そして、X 軸のリンクを直接(1 対 1)に変更します。



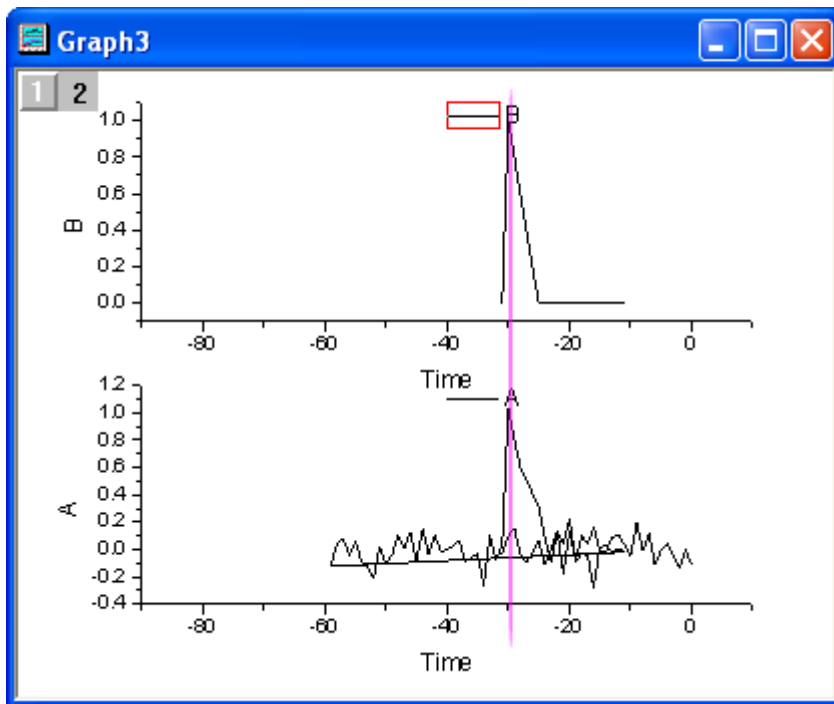
10. OK ボタンをクリックすると、2つのグラフで X 軸が同じ値になります。



11. データセットを移動可能にするために、グラフ内の鍵のアイコン上でクリックし、再計算モード:しないに変更します。確認メッセージが開いたら、OK をクリックして閉じます。
12. 上グラフを選択して、メニューから解析:データ操作:水平移動を選択して、レイヤ内に三角形ボタン付きの垂直線を追加します。三角形のボタンをクリックしてコンテキストメニューを開き、平行移動後もツールを表示のチェックを外します。再度コンテキストメニューを開き、曲線シフトを選択し、ダイアログを開きます。値を 49 にセットします。



13. OK をクリックして、変換します。2つの信号を整列できました。



4.3.10. デシメーションと包絡線

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 デシメーション](#)
- [4 信号の包絡線](#)

サマリー

デシメーションは、N 個ごとのサンプルを 1 つに統合することによって信号系列のサイズを小さくするために使用されます。包絡線検出は、入力信号に包絡線を追加します。Origin の包絡線ツールは、「上部」境界線と「下部」境界線の出力が可能です。

学習する項目

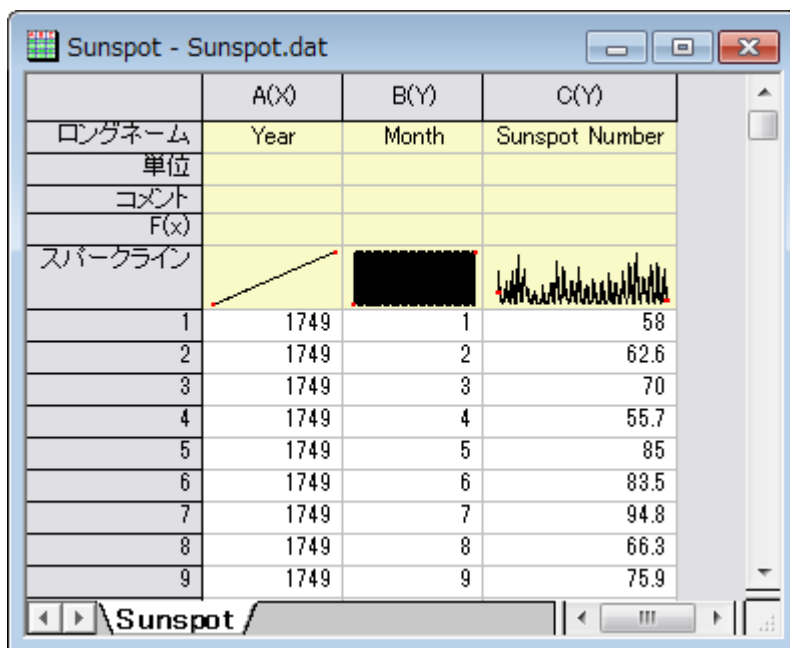
このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

1. 入力信号系列のサイズ縮小のために信号を間引く
2. 包絡線を追加するために包絡線検出を行う

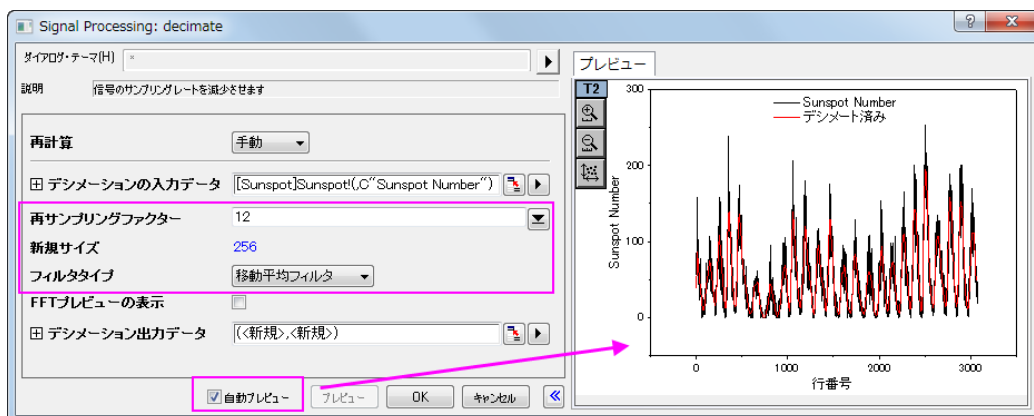
デシメーション

このチュートリアルでは、太陽の黒点数データに対してデシメーションを実行します。太陽黒点数のソースデータは、200年以上にわたって毎月測定されたものです。ここでは、デシメーションを使用して、データセットを年ごとに1つの黒点数に削減しましょう。

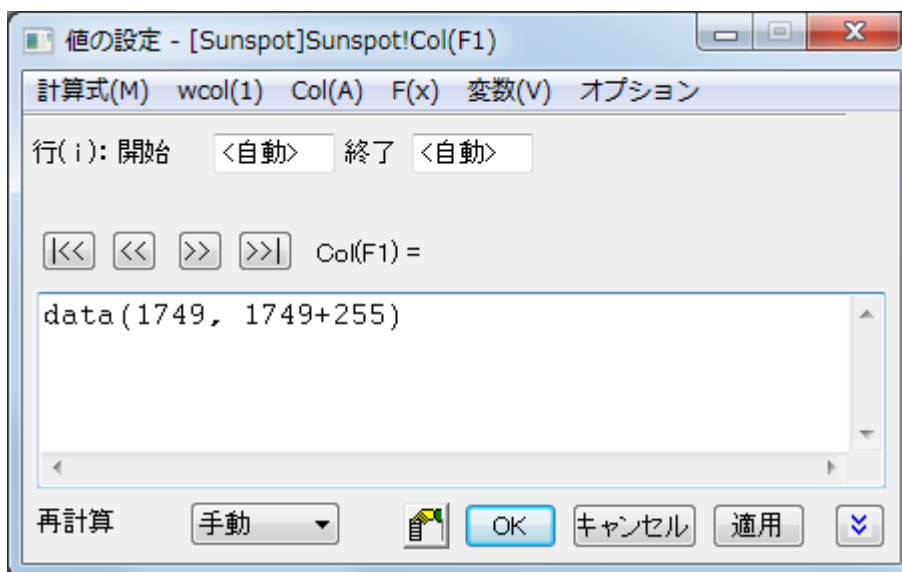
1. 新しいワークブックを作成し、<Origin インストールディレクトリ>\Samples\Signal Processing\Sunspot.dat をインポートします。



2. 列 A を選択して、右クリックし、コンテキストメニューから列 XY 属性の設定: Y 列と選択してこの列の属性を Y に設定します。これにより太陽の黒点数は X データとしての A 列に関連付けられなくなります。デシメーションの場合、単調な X データが必要なため、この操作を行います。
3. B、C 列を選択して、解析: 信号処理: デシメーションを選択し、デシメーション: decimate ダイアログを開きます。
4. ダイアログでは、再サンプリングファクターとして、12 を入力し、フィルタタイプを移動平均フィルタに変更します。自動プレビューにチェックを付け、右パネルでプレビューを表示します。



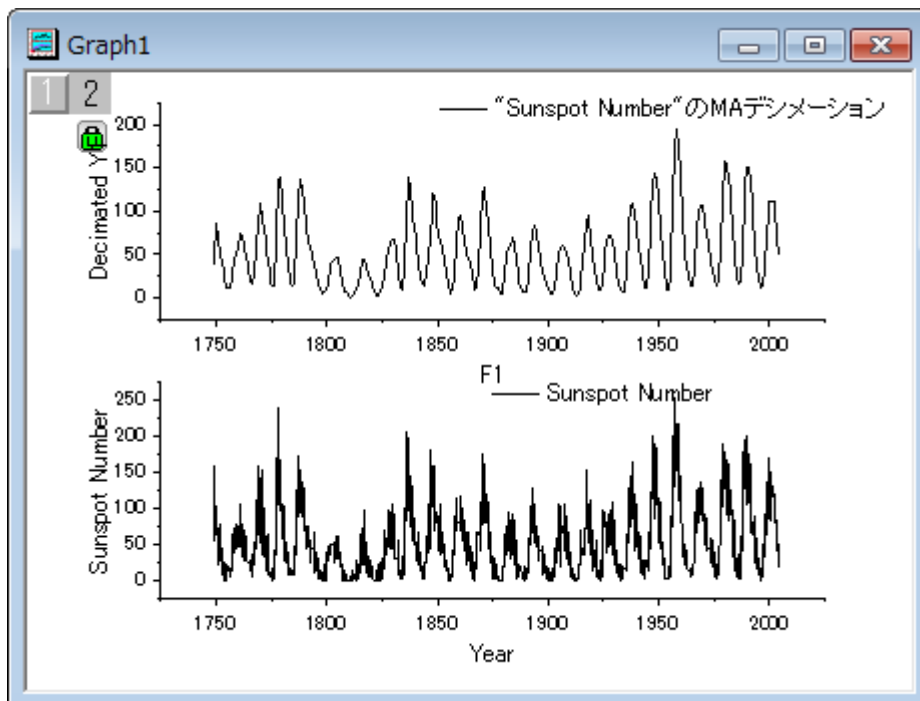
5. **OK** をクリックして結果を出力します。
6. ワークシートで、列 D(結果から生成された X 列)を選択し、右クリックしてコンテキストメニューから**挿入**を選択します。再度列 D を右クリックして、**列 XY 属性の設定:Y 列**を選択して、この列の属性を Y とします。
7. 挿入された列を選択して右クリックし、**列 XY 属性の設定:X 列**を選択し、この列を X データとします。列を再度右クリックして、**列値の設定**を選択し、**列値の設定**ダイアログボックスを開き、テキストボックスに `data(1749, 1749 + 255)`を入力して、**OK** をクリックします。



8. 列 A を選択して、**列 XY 属性の設定:X 列**と選択してこの列を X データとします。最終的なワークシートは下図のようになります。

	A(X1)	B(Y1)	C(Y1)	F1(X2)	D(Y2)	E(Y2)
ロングネーム	Year	Month	Sunspot Number		Decimated	Decimated
単位						
コメント						"Sunspot Number"のMAデシメーション
F(x)				(1749, 1749+)		
スパークライン						
1	1749	1	58	1749	1	39.80828
2	1749	2	62.6	1750	13	86.53432
3	1749	3	70	1751	25	65.58876
4	1749	4	55.7	1752	37	46.8645
5	1749	5	85	1753	49	39.20533
6	1749	6	83.5	1754	61	17.91893
7	1749	7	94.8	1755	73	10.72722
8	1749	8	66.3	1756	85	10.39822
9	1749	9	75.9	1757	97	20.27811
10	1749	10	75.5	1758	109	43.33136
11	1749	11	158.6	1759	121	49.33373
12	1749	12	85.2	1760	133	60.62604

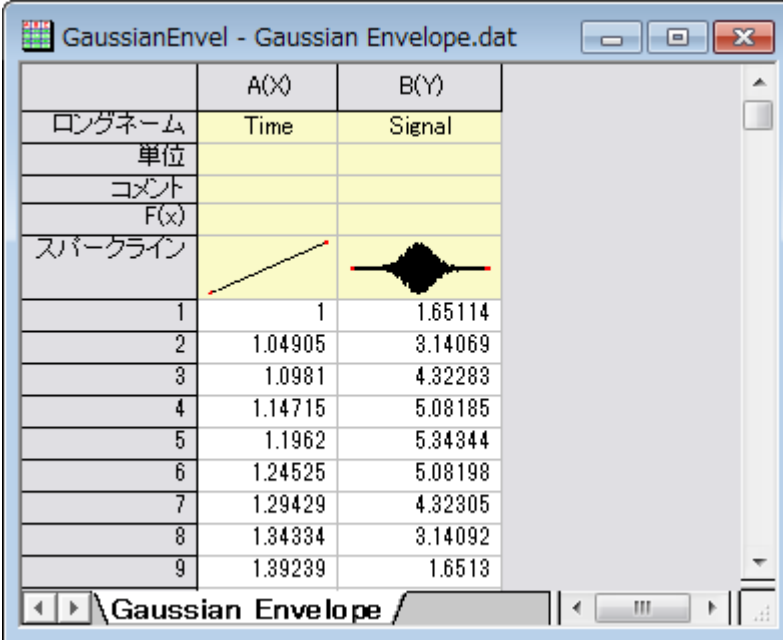
9. Ctrl キーを押しながら、列 C と列 E を選択して、**作図:基本の 2D グラフ:垂直 2 区分**を選択します。下図のように、滑らかなデシメーション曲線を描くことができました。



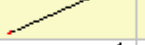

包絡線

1. 新しいワークブックを用意します。

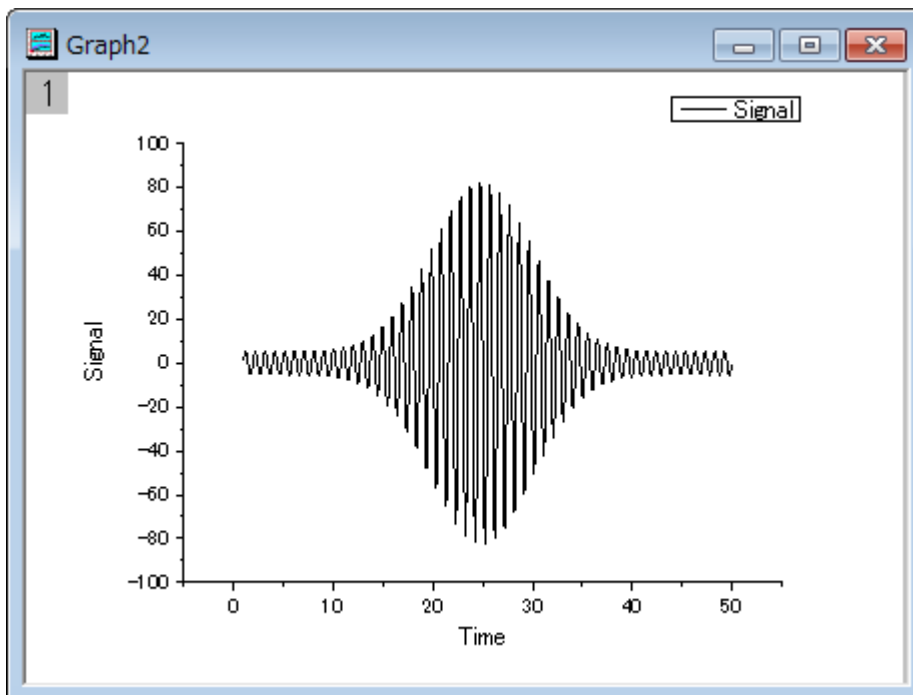
- メニューの**データ:ファイルからインポート:単一 ASCII インポート**を選択し、<Origin インストールフォルダ>\Samples\Signal Processing\Gaussian Envelope.dat ファイルをインポートします。



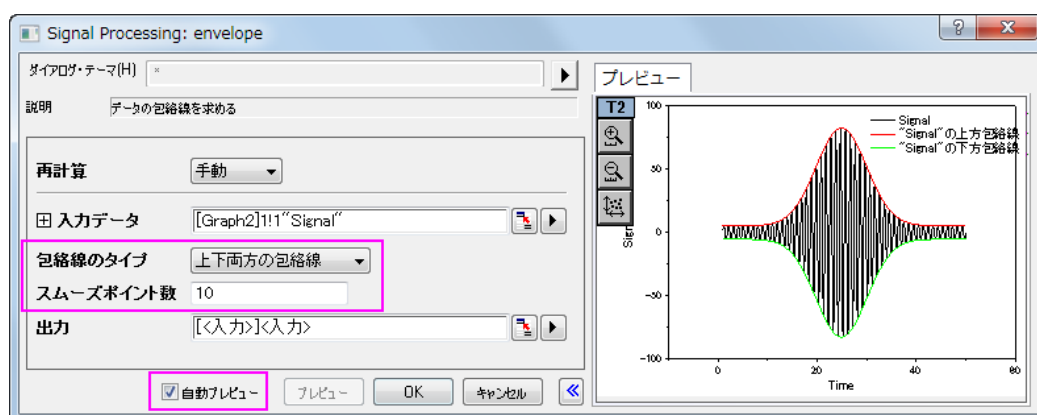
The screenshot shows the 'Gaussian Envelope' data table with the following data:

	A(X)	B(Y)
ロングネーム	Time	Signal
単位		
コメント		
F(x)		
スパークライン		
1	1	1.65114
2	1.04905	3.14069
3	1.0981	4.32283
4	1.14715	5.08185
5	1.1962	5.34344
6	1.24525	5.08198
7	1.29429	4.32305
8	1.34334	3.14092
9	1.39239	1.6513

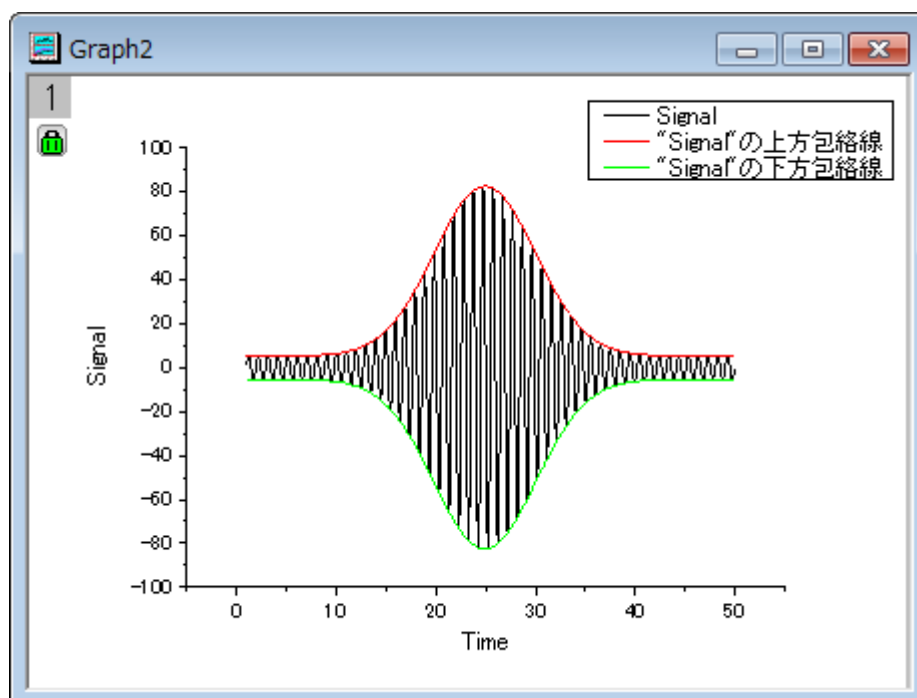
- B 列を選択し、**作図:基本の 2D グラフ:折れ線**を選択して折れ線グラフを作図します。



- このグラフをアクティブにして、**解析:信号処理:包絡線**を選択し、**包括線: envelope** ダイアログを開きます。
- ダイアログで、**包絡線のタイプ**を上下両方の包絡線にし、**スムーズポイント数**を 10 に設定します。ダイアログの**自動プレビュー**チェックボックスにチェックを付け、右パネルでプレビューできるようにします。



6. **OK** ボタンをクリックして、上側と下側に包絡線を表示したグラフを作成します。



4.3.11. 立ち上がり時間

サマリー

立ち上がり時間は、指定した低状態レベルから指定した高状態レベル(または指定した高状態レベルから指定した低状態レベル)に信号が変化するのに必要な時間を参照します。Originの立ち上がり時間パネルツールは、四角形オブジェクトで直感的にグラフの領域を選択し、その領域の上昇または下降の時間を計算できます。

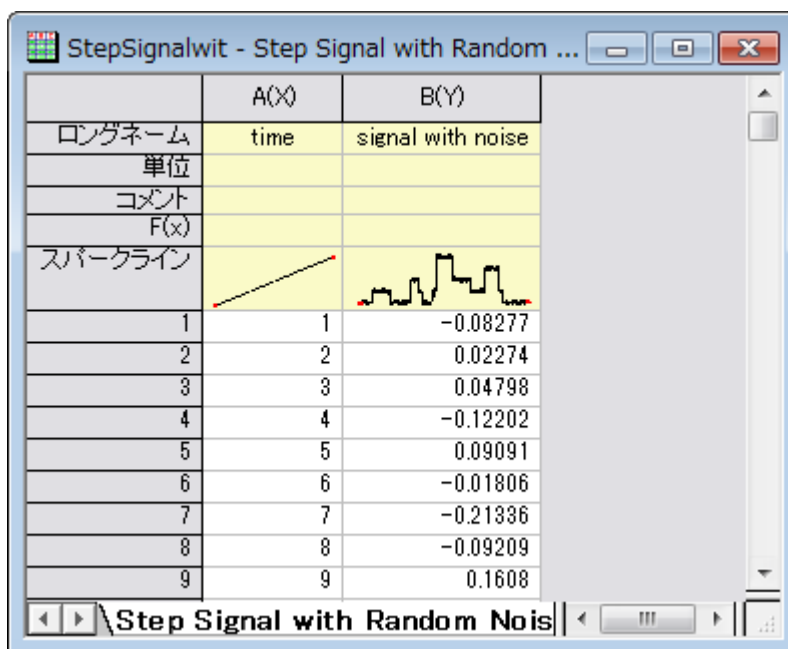
学習する項目

このチュートリアルで以下のことを行います：

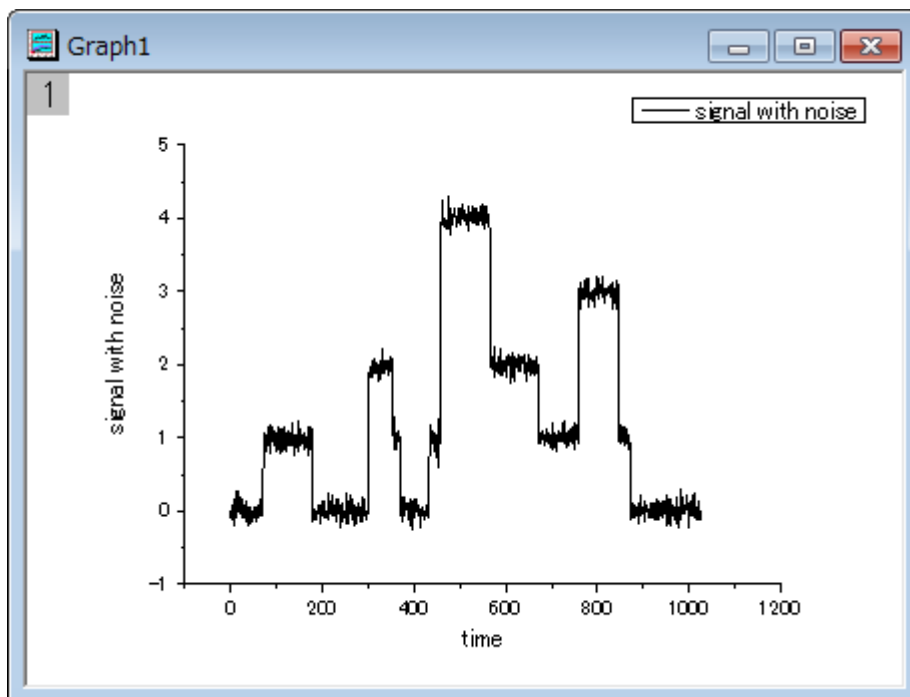
1. 立上がり時間パネルツールを使用して下降時間を計算する
2. 下降時間計算の設定を変更する
3. グラフに表示する要素を変更する
4. 出力設定を変更し、結果を出力する


ステップ

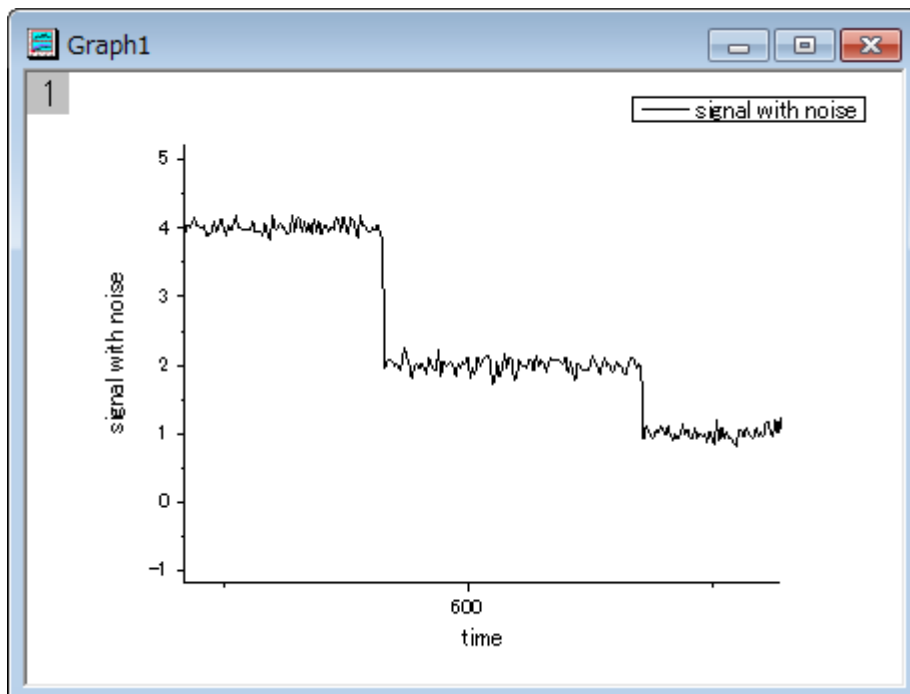
1. 新しいワークブックを用意します。
2. メニューの**データ:ファイルからインポート:単一 ASCII ファイル**を選択し、<Origin インストールフォルダ>\Samples\Signal Processing\Step Signal with Random Noise.dat ファイルをインポートします。



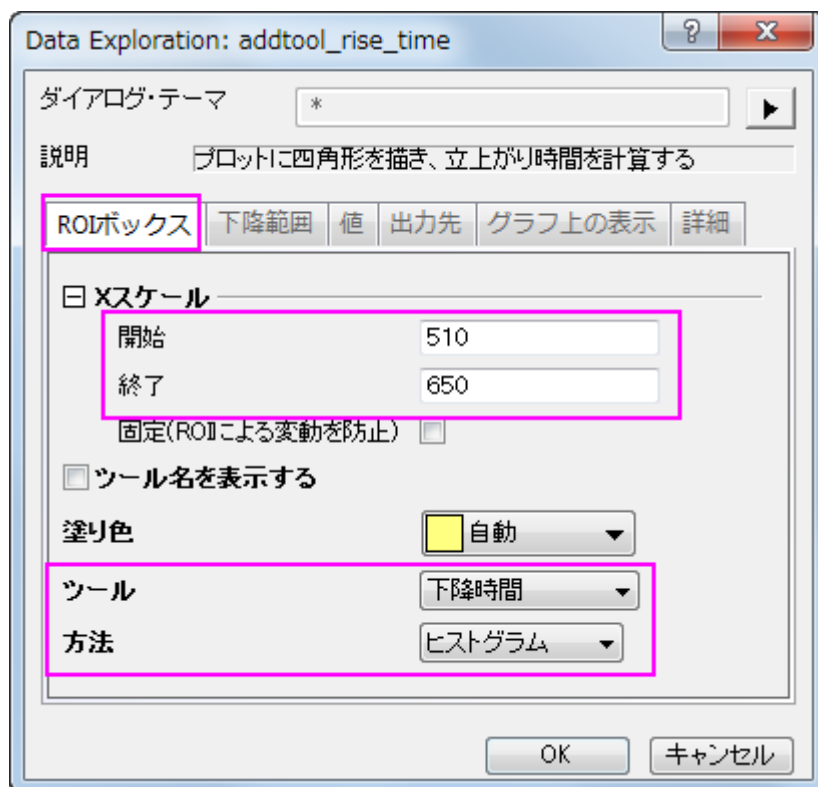
3. B 列を選択し、メニューから**作図:基本の 2D グラフ:折れ線**を選択してグラフを作図します。



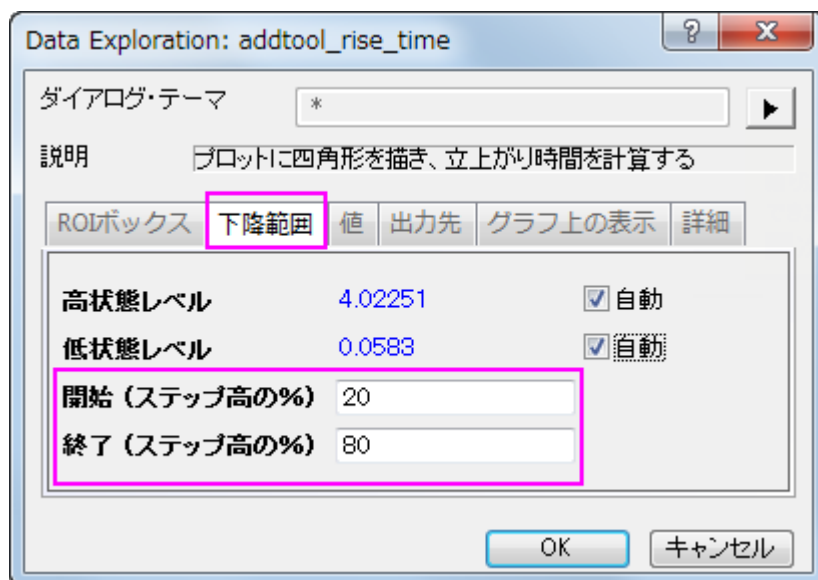
4. プロット操作・オブジェクト作成ツールバーの軸スケールの拡大ボタン  をクリックして、グラフ内の X 範囲が 500 から 700 の範囲を選択して拡大します。



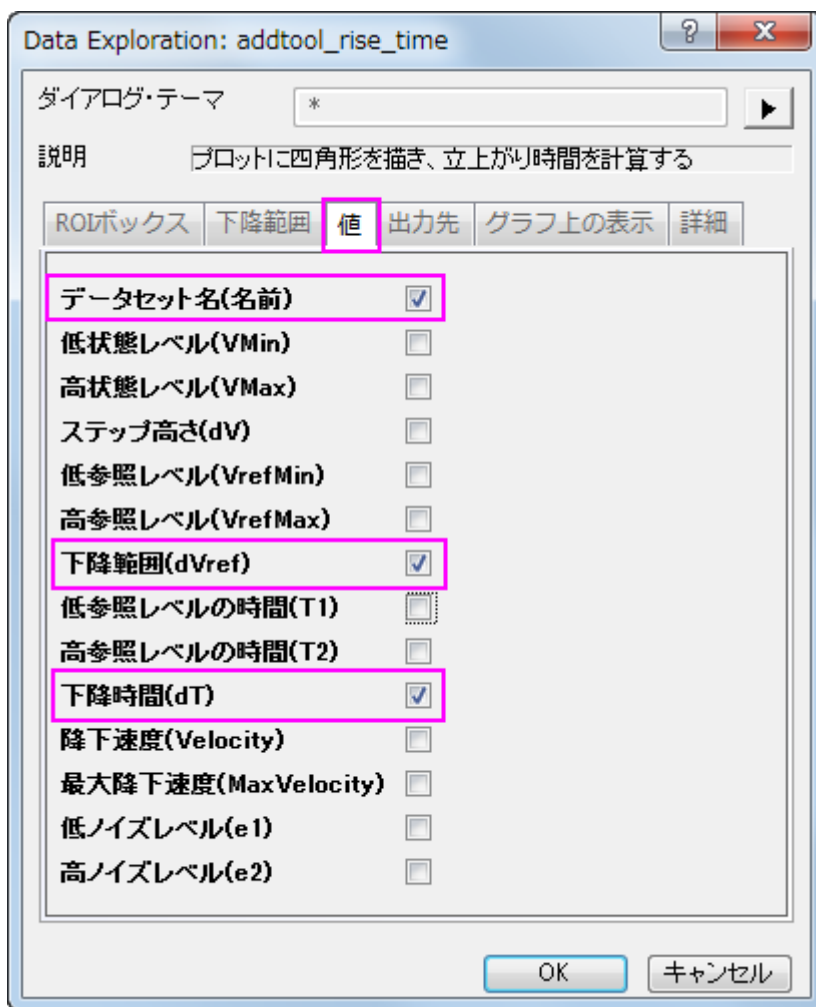
5. Origin メニューから **ガジェット: 立ち上がり時間 ROI ツール** を選択し、このツールを開始します。
6. ダイアログボックスで、**ROI ボックスタブ** を開き、**X スケールの開始を 510 にし、終了を 650 に** します。また、**ツールを下降時間にし、方法をヒストグラムに変更** します。



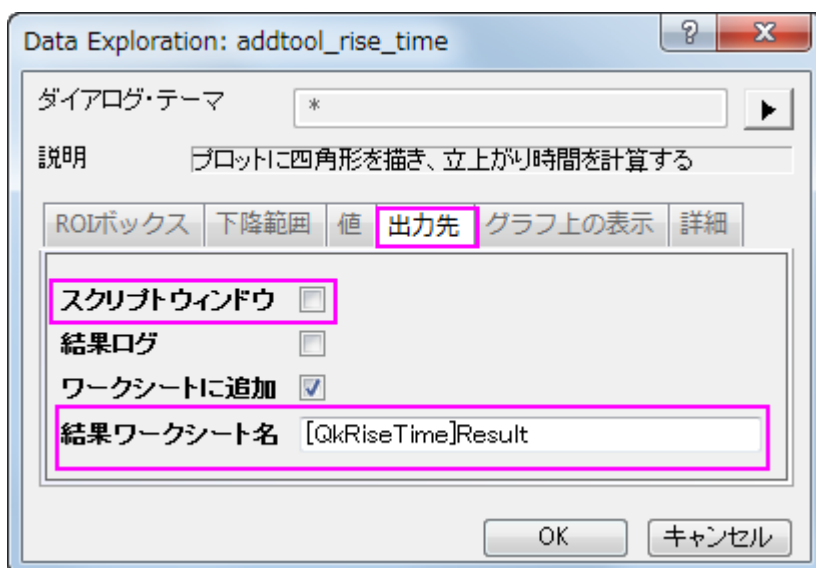
7. 下降範囲タブを開き、開始と終了を 20 と 80 に変更します。



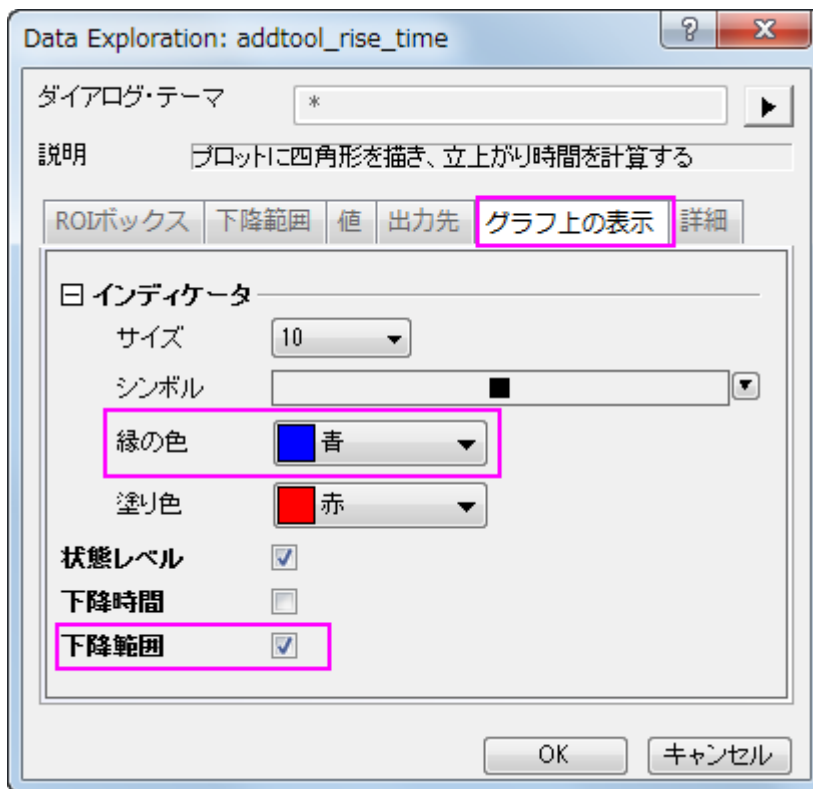
8. 値タブでは、データセット名(名前)、下降範囲(dVref)、下降時間(dT)以外のチェックをはずします。



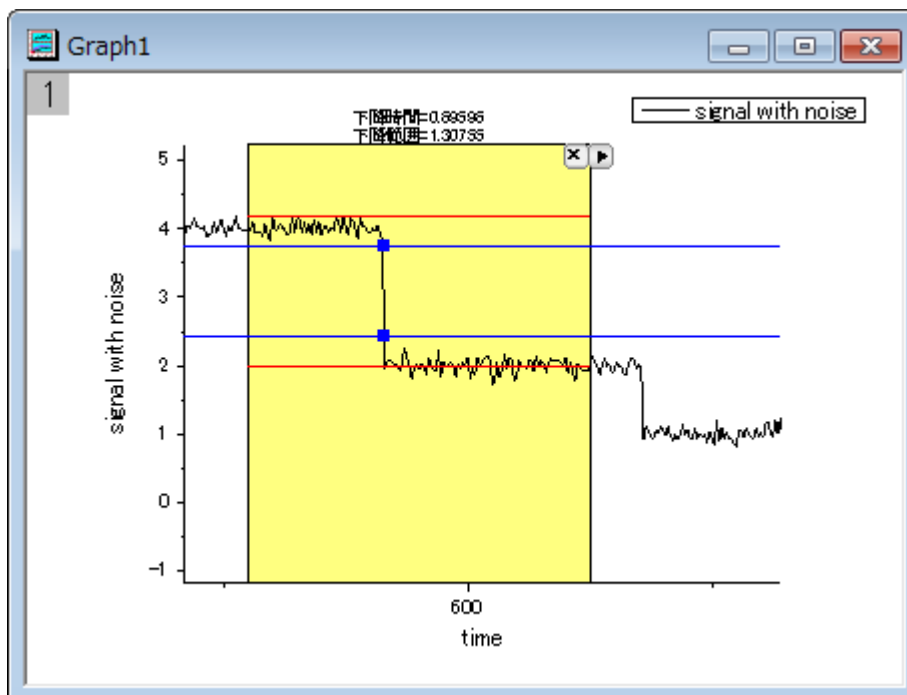
9. 次の出力先タブで、スクリプトウィンドウのチェックを外し、ワークシートに追加のチェックを付けます。



10. グラフ上の表示タブを開き、インディケータの項目を開いて、緑の色を青にし、下降範囲のチェックを付けます。下降範囲にチェックを付けます。

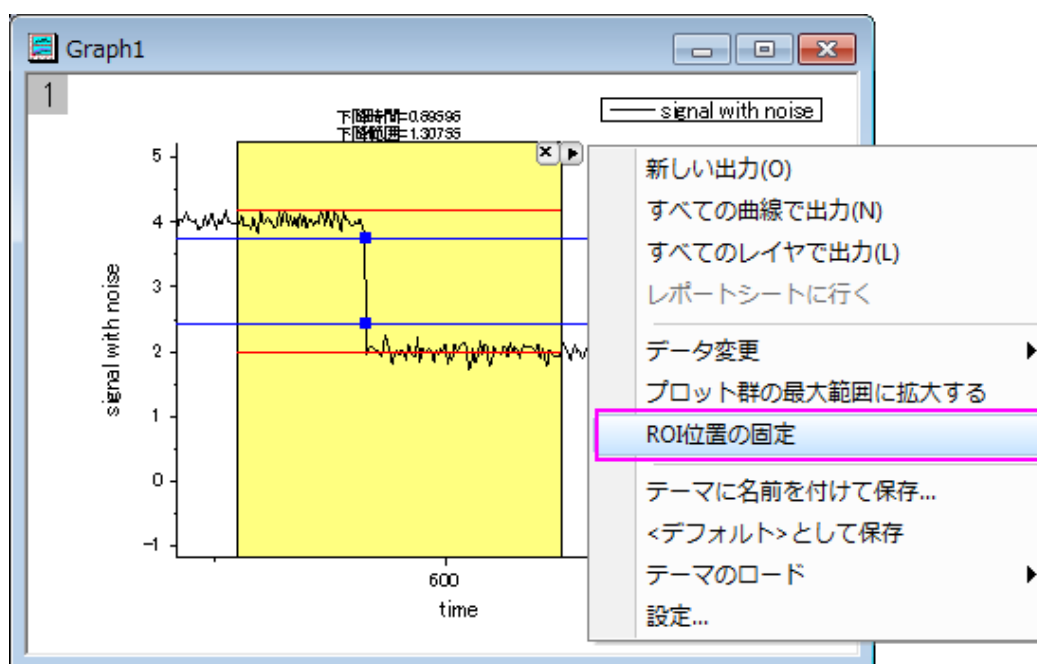


11. **OK** ボタンをクリックし、ROI ボックスをグラフに配置します。

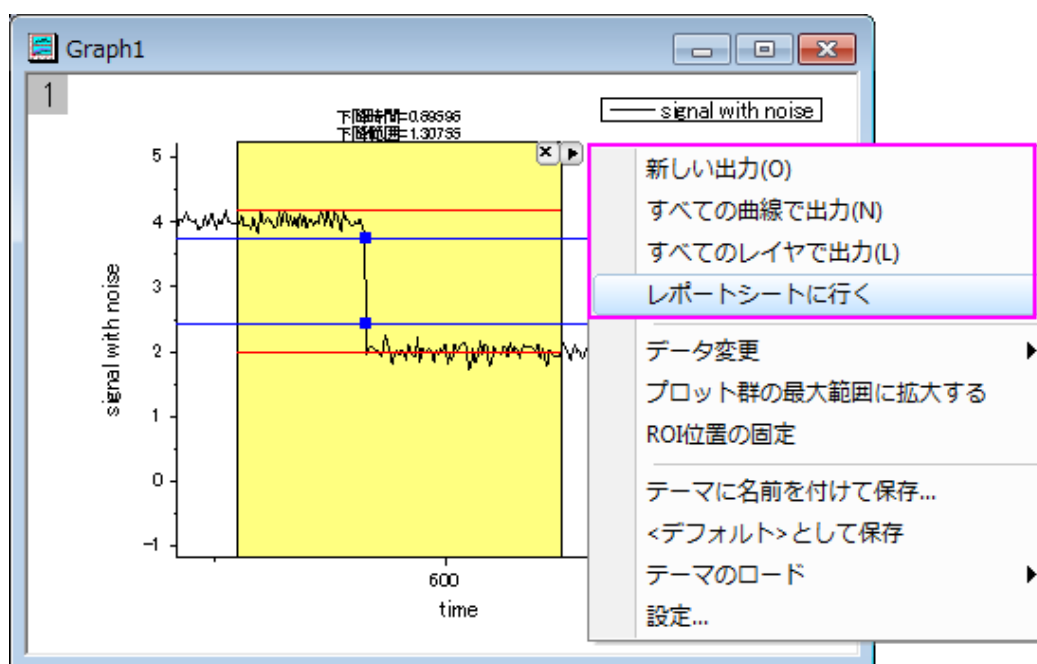


12. 上図のように、2つの赤い水平線が高いレベルと低いレベルに表示され、折れ線グラフ上のインディケータの2つの青い線の間が下降範囲です。ROI ボックスの上部に下降時間と下降範囲が表示されます。

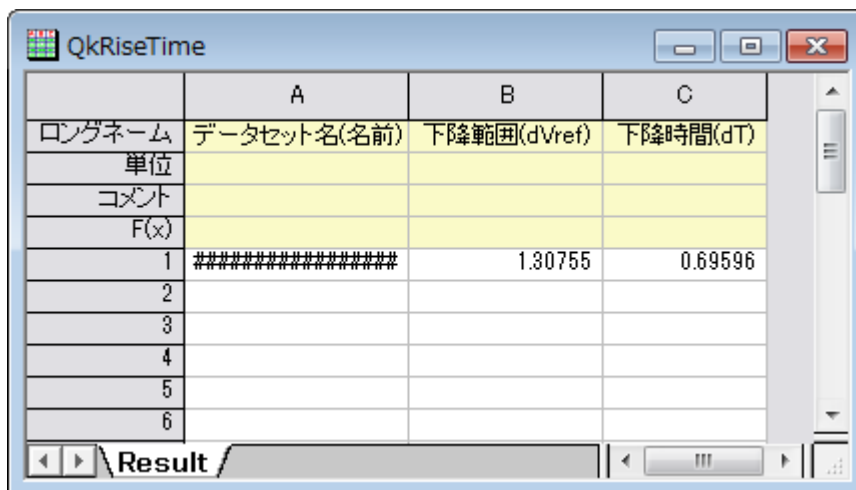
13. 三角形のボタンをクリックして、コンテキストメニューを開き、**ROI 位置の固定**を選択すると、移動できなくなります。



14. 再度コンテキストメニューを開き、**新しい出力**を選択して結果を出力します。再度矢印ボタンをクリックし、メニューから**レポートシートに行く**を選びます。



15. すると、レポートシートがアクティブになり、**値タブ**で選択した結果を見ることができます。



	A	B	C
ロングネーム	データセット名(名前)	下降範囲(dVref)	下降時間(dT)
単位			
コメント			
F(x)			
1	#####	1.30755	0.69596
2			
3			
4			
5			
6			



4.3.12. 音の処理

サマリー

Origin の機能の中にはいくつか便利な信号処理の機能、例えばスムージング、FFT フィルタ、特殊な分析ツールである高速フーリエ変換(FFT)等があります。これらは例えば、音の解析を行う際に使用できます。このチュートリアルでは、ノイズのスペクトル領域を元に音の信号(.WAV ファイル)から特定のノイズを取り除きます。

必要な Origin のバージョン:Origin 9 SR0

学習する項目

1. サウンドファイル(.WAV)を Origin にインポートする
2. サンプリング間隔情報を表示する
3. FFT ガジェットを使用して、信号の周波数スペクトルを確認する
4. 音の信号に対して FFT フィルタを実行する
5. フィルタをかけた信号を.WAV ファイルとしてエクスポートする

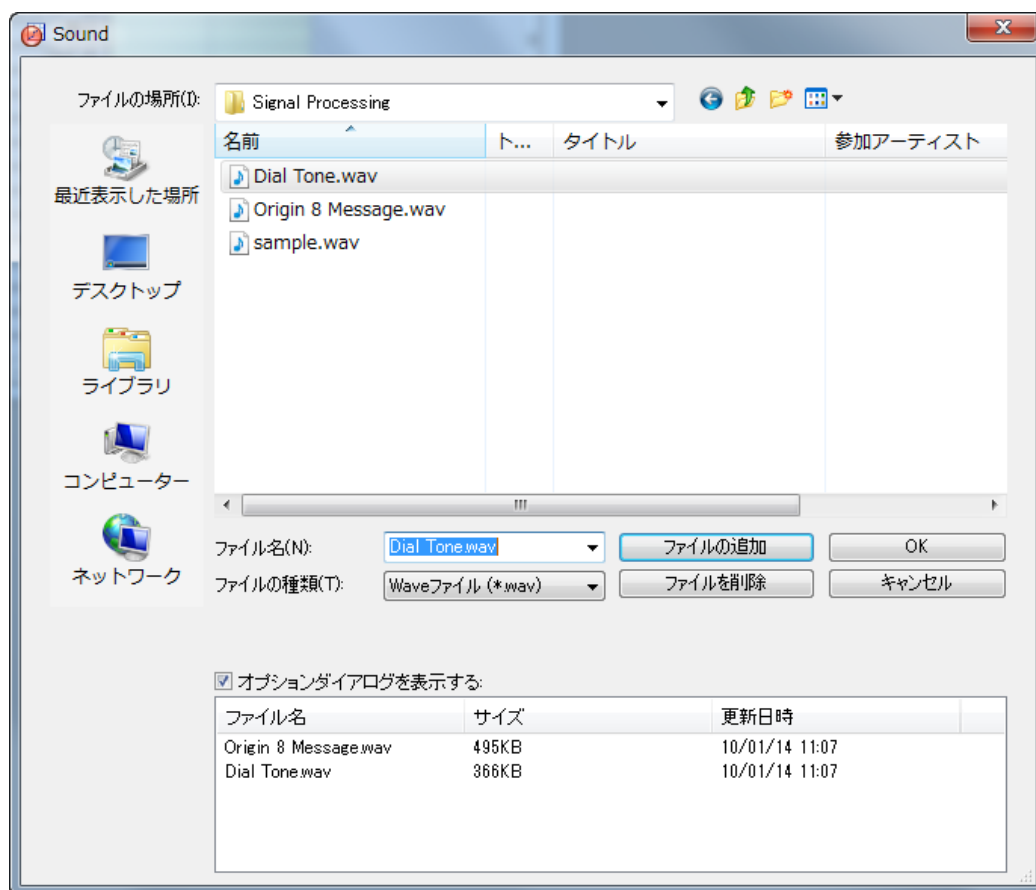
ステップ

このチュートリアルでは、Origin のインストールフォルダ内のサブフォルダ、"Samples\Signal Processing"の中にある「Origin8 Message.wav」と「Dial Tone.wav」ファイルを使用します。

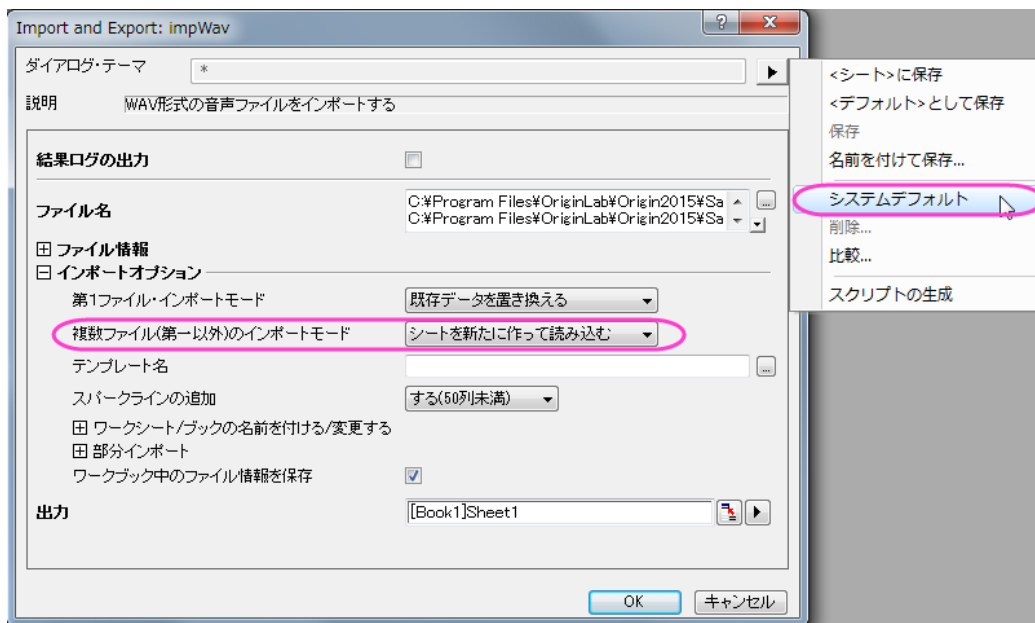
Origin8 Message.wav ファイルを再生すると、後ろで電話の電子音が聞こえることが分かります。2 番目の wav ファイルはこの電子音を記録したものです。

1. Origin を起動して新しいプロジェクトを開始し、空のワークブックとワークシートを準備します。

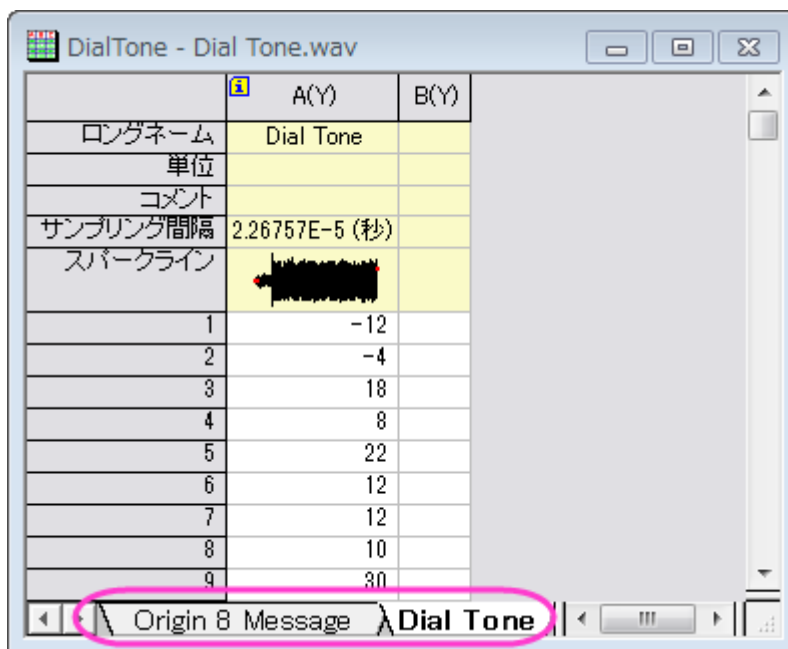
- メニューで**ファイル:インポート:音声(WAV)**と操作して **Sound** ダイアログを開きます。(ヒント:メニュー項目内に見当たらない場合は**ファイル:インポート:カスタム化**と操作して**インポートメニューのカスタマイズ**ダイアログで追加します。)\Samples\Signal Processing\フォルダまでブラウズし、その中にある「Origin 8 Message.wav」と「Dial Tone.wav」をインポートリストに追加します。**オプションダイアログを表示する**チェックボックスにチェックが付いている事を確認して **OK** をクリックします。



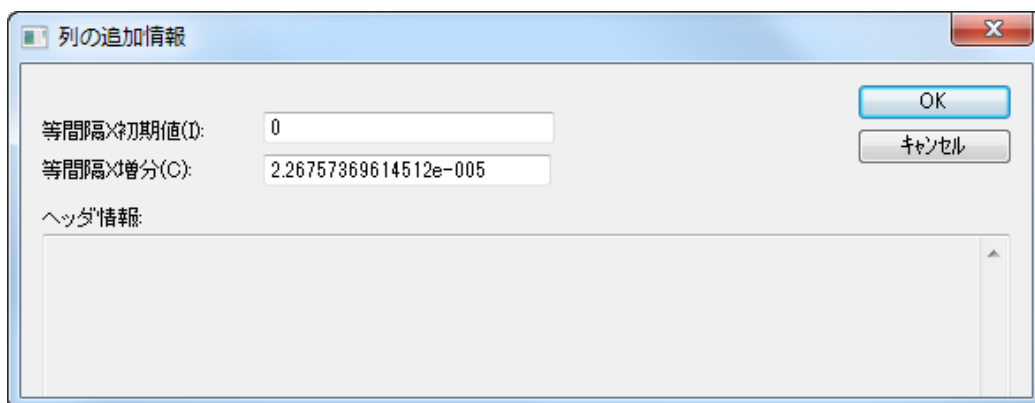
- Import and Export: impWav** ダイアログが表示されます。一番上の**ダイアログ・テーマ**の隣にある三角形のボタンをクリックし、コンテキストメニューから**システムデフォルト**を選択します。**インポートオプションノードの複数ファイル(第一以外)のインポートモード**ドロップダウンから**シートを新たに作って読み込む**を選択します。



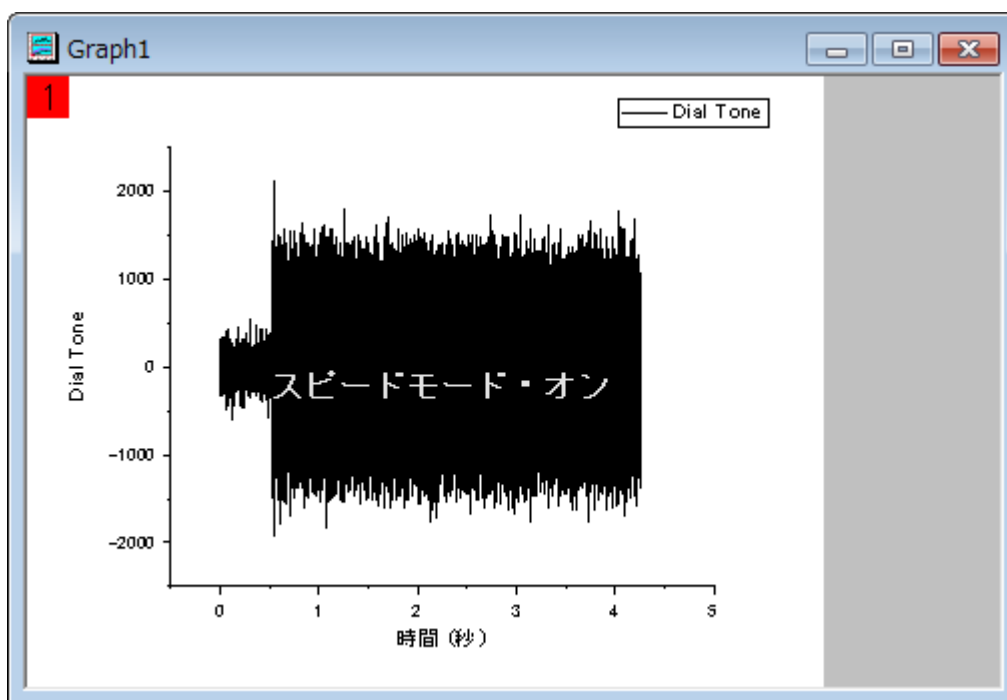
4. OK をクリックして 2 つのサウンドファイルをインポートします。



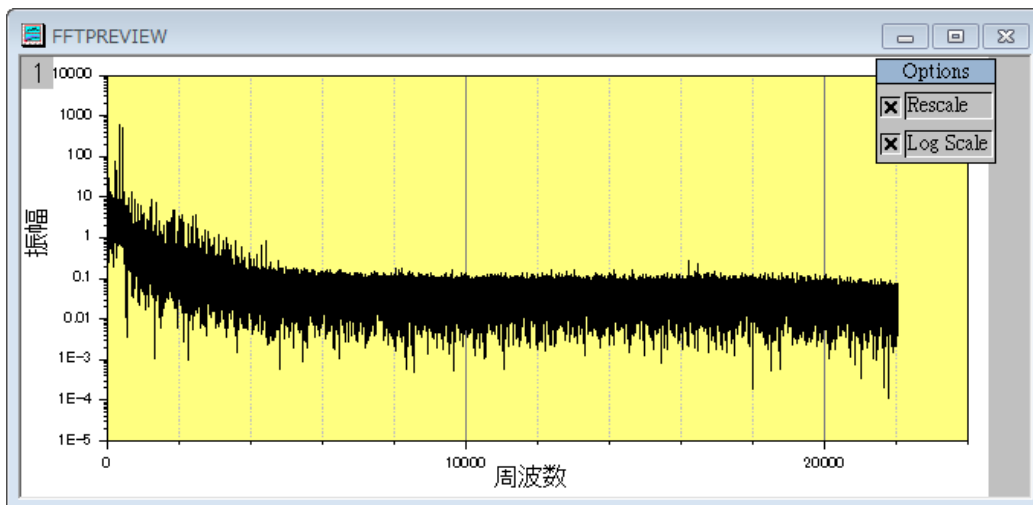
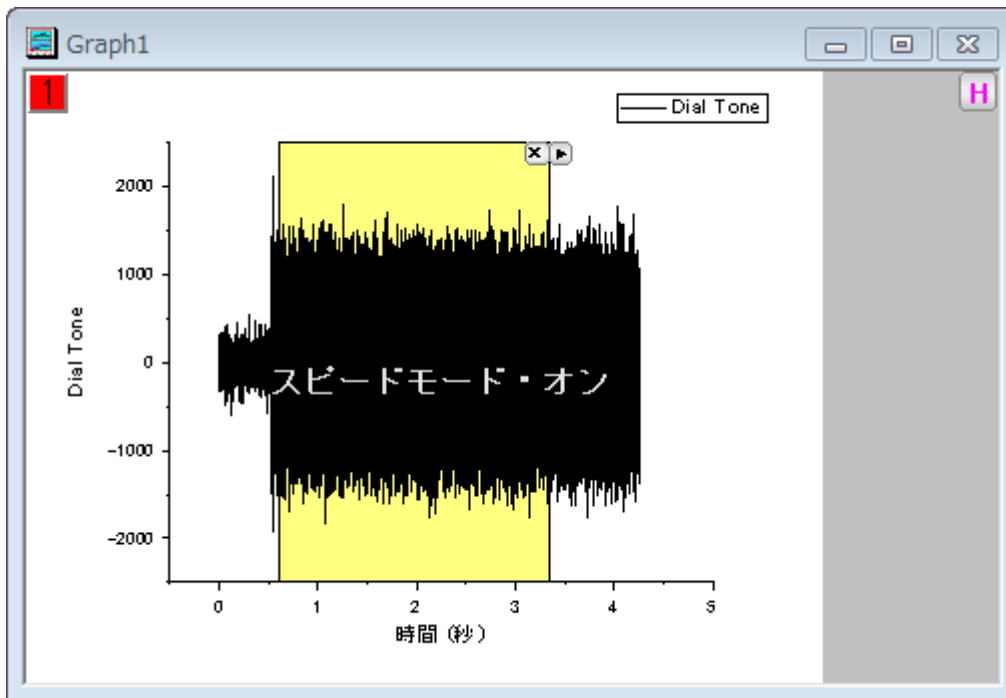
5. それぞれのワークシートで、サンプリング間隔が同じ値である $2.26757E-5$ (秒)である事が分かります。列の左上に小さくある *i* アイコンをクリックすると、列の追加情報ダイアログが開き、サンプリング間隔の情報を確認できます。OK ボタンをクリックして、ダイアログボックスを閉じます。



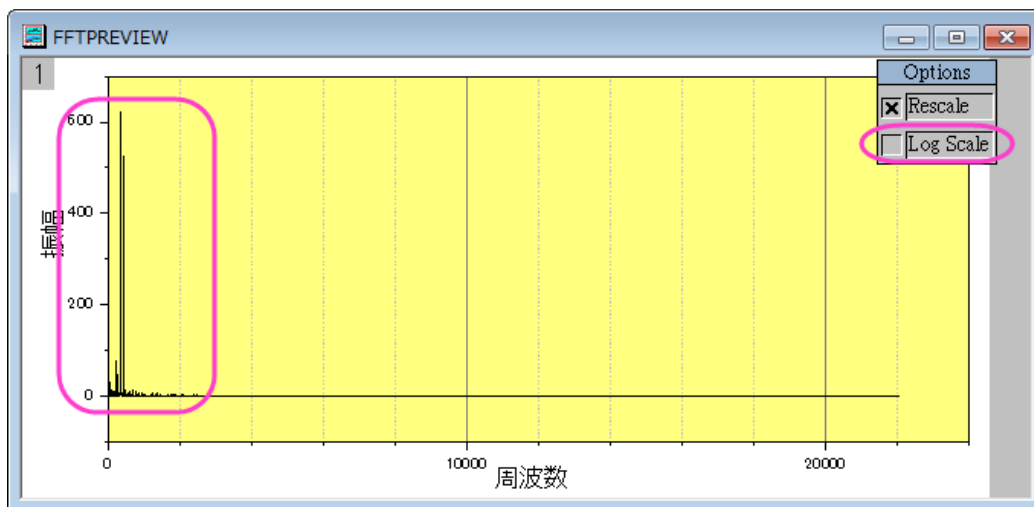
- ワークシート **Dial Tone** をアクティブにし、列 A を選択してから **作図:線図:折れ線** と操作して折れ線グラフを作図します。



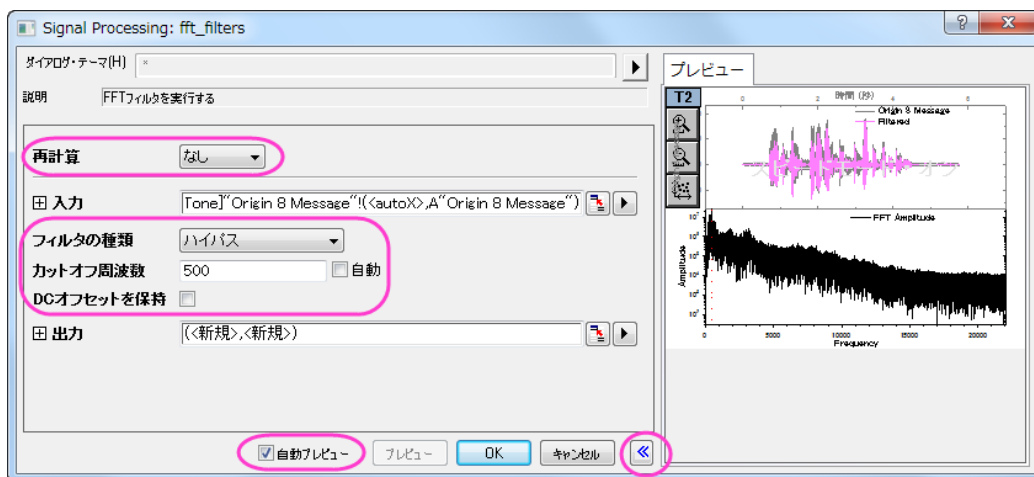
- このグラフでメニューの **ガジェット:FFT ROI ツール** と操作して **Data Exploration: addtool_curve_fft** ダイアログを開きます。デフォルトの設定のままで **OK** をクリックし、データに FFT を実行します。そして、結果と共に **FFTPREVIEW** グラフも作図します。



8. **FFTPREVIEW** グラフで **Log スケール** の×印を外し、メニューで**グラフ操作:再スケール**をして**全てを表示**と選択してグラフを再スケールします。周波数の分布は主に 2000 ヘルツよりも下で、最も大きなピークは 500 ヘルツのあたりにあることが分かります。



9. ワークシート **Origin 8 Message** をアクティブにし、列 A を選択します。メニューから **解析: 信号処理: FFT フィルタ** と操作して **Signal Processing: fft_filters** ダイアログを開きます。ダイアログで、**再計算** をなしに、**フィルタの種類** をハイパスに、**カットオフ周波数** の自動チェックを外して値に 500 を入力します。**DC オフセットを保持** のチェックを外します。結果をプレビューするにはダイアログ下部にある **自動プレビュー** にチェックを付けます。これで右側のパネルにプレビューが表示されるようになります。なお、この右側パネルは右下の二重の矢印をクリックすることで非表示にしたり表示したりと切り替えられます。

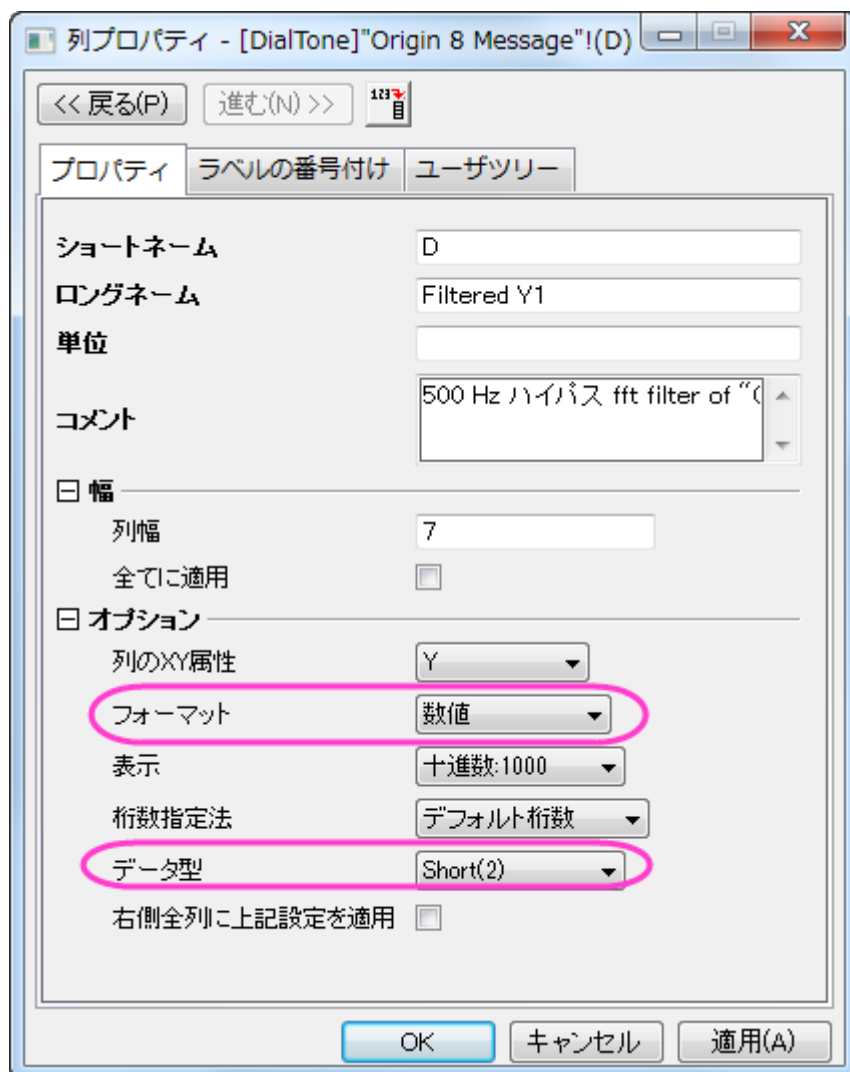


Note: **再計算** がなしの場合、**データの種類** を変更するときに、結果を再計算の鍵アイコンがない新しい列にコピーする必要があります。ステップ 11 で紹介しているので確認してください。

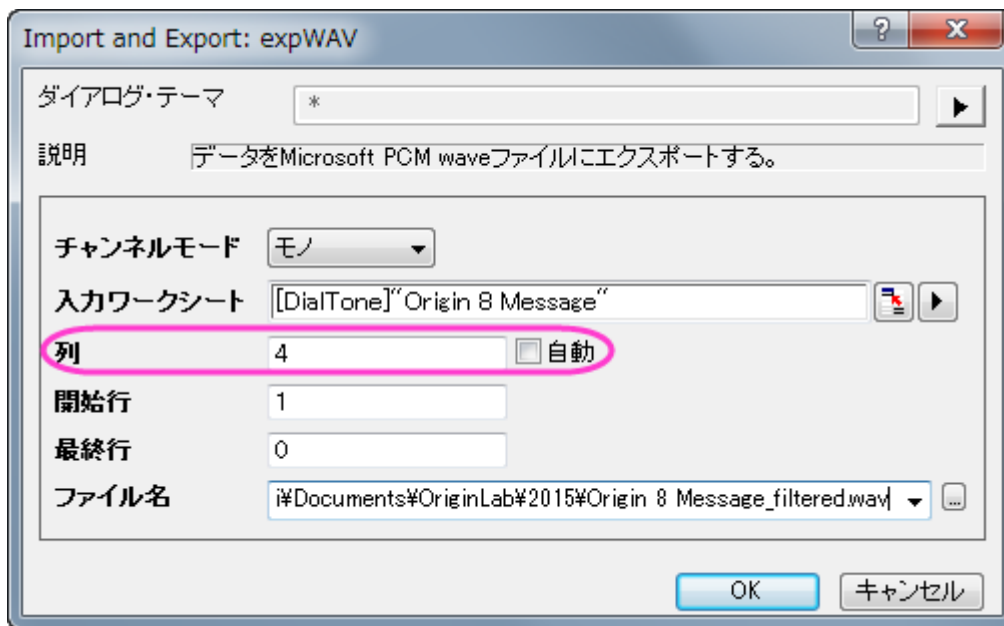
10. **OK** をクリックして、結果を作成します。フィルタを行った結果が浮動小数形式である事が分かります。新しい WAV ファイルを作成するには、この形式を整数に変える必要があります。

	A(Y)	B(Y)	C(X1)	D(Y1)
ロングネーム	Origin 8 Message		Filtered X1	Filtered Y1
単位				
コメント				500 Hz ハイパス fft filter of "Origin 8 Message"
サンプリング間隔	2.26757E-5 (秒)			
スパークライン				
1		126		0 60.05184
2		112	2.26757E-5	41.48331
3		120	4.53515E-5	45.0095
4		112	6.80272E-5	32.64136
5		122	9.07029E-5	38.38947
6		134	1.13379E-4	46.26404
7		130	1.36054E-4	38.27481
8		144	1.5873E-4	48.43108
9		106	1.81406E-4	6.74163
10		136	2.04082E-4	33.2147
11		144	2.26757E-4	37.858
12		168	2.49433E-4	58.67861

11. 列 D(フィルタをかけた結果の列)を選択します。それから右クリックをして列フォーマットを選択し、列プロパティダイアログを開きます。オプションノードのフォーマットを数値に設定し、データ型を Short(2)に設定します。OK ボタンをクリックしてこの設定を列 D に適用してダイアログを閉じます。



- 列 D を選択したまま、メニューから**ファイル:エクスポート:サウンド(WAV)**と選択します。このダイアログではファイル名を入力し(例えば、*Origin 8 Message_filtered.wav*)、分かりやすい場所に保存します。**オプションダイアログの表示**チェックボックスに、チェックが付いていることを確認します。
- 保存ボタン**をクリックすると、**Import and Export: expWAV** ダイアログが表示されます。列の**自動チェック**を外し、4に変更します。



Note:列は Y 列のために指定します。Origin はある場合は自動的にサンプリング間隔を探すか対応する X を元に出
力します。もし X 列が無かったり X 列が等間隔ではない場合、エラーメッセージが出力されます。

14. **OK** をクリックして列 D をサウンドファイルとしてエクスポートします。これでこのサウンドファイルを再生し、電子音がなくなったことを確認してみてください。また、スペクトルを確認してみても、電子音の情報は取り除かれていることが確認できます。

4.4. ピーク解析

4.4.1. ピークアナライザで基線の追加と減算を行う

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ステップ](#)
 - [3.1 二次微分方式での基線の追加](#)
 - [3.2 ALS 方式での基線の追加\(Pro\)](#)
 - [3.3 スペクトルデータから基線の減算](#)

サマリー

OriginPro では、ピークアナライザを使って、基線の作成または減算オプションを実行することができます。基線を作成する方法は複数あります。自動または手動でアンカーポイントを作成したり、補間を行ってアンカーポイントを接続したり、関数でフィットできます。

必要な Origin のバージョン:2016SR0

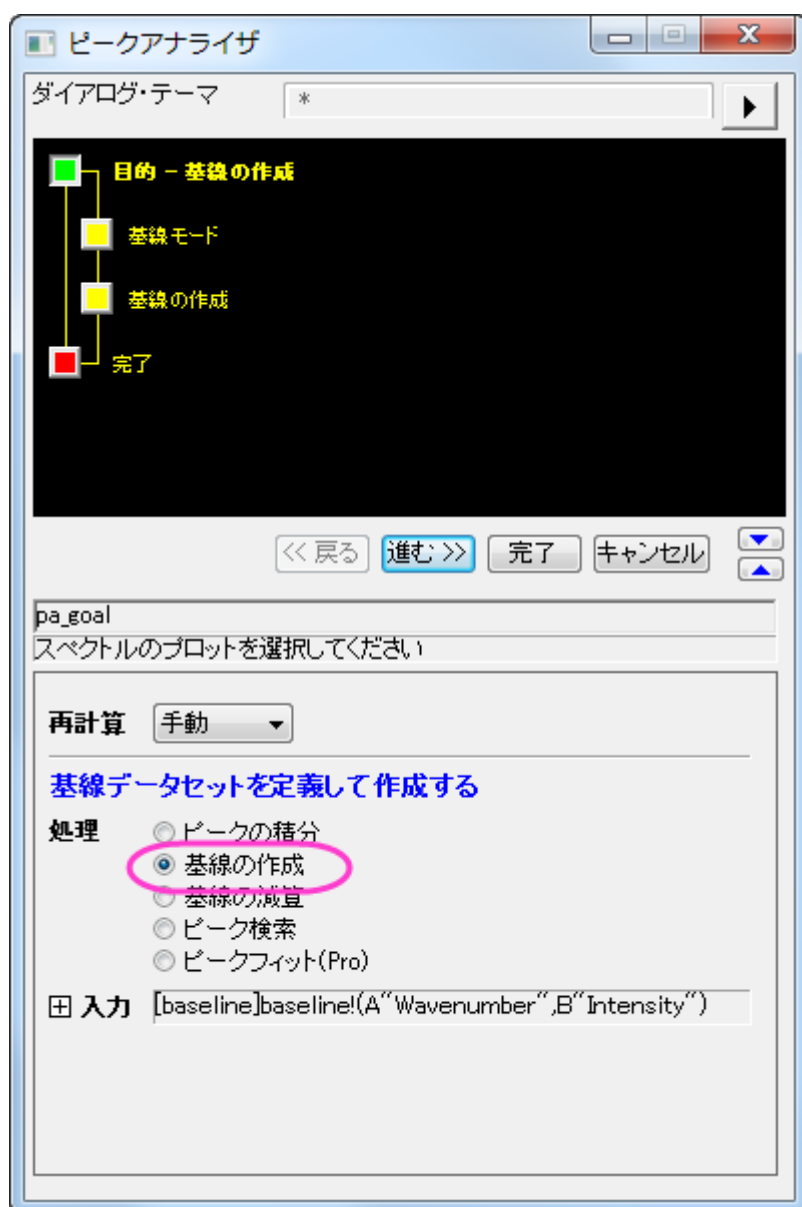
学習する項目

- 二次派生方式での基線の追加
- Asymmetric Least Squares (ALS) 方式(Pro)での基線の追加
- スペクトルデータから基線を減算する方法

ステップ

二次微分方式での基線の追加

1. 新しいワークブックを開き、<Origin EXE フォルダ>\Samples\Spectroscopy\Baseline.dat. ファイルをインポートします。2 列目を選択します。メインメニューで、**解析:ピークと基線:ピークアナライザ**と操作して**ピークアナライザ**ダイアログを開きます。
2. **ピークアナライザ**の初めのページ(ゴールページ)で**処理グループ内の基線の作成**を選びます。「進む」をクリックし、「**基線モード**」ページに移動します。



- 次に、このスペクトルに対するアンカーポイントを定義して、ユーザ定義の基線を作成します。**基線モード**ページで、**基線モード**のドロップダウンリストから**ユーザ定義**を選びます。**スペクトルにスナップする**にチェックをつけると、基線のアンカーポイントを追加したり移動した際にスペクトルにくっつくようになります。
- アンカーポイントを見つける**ノードの中にある最初の2つの方法が最も頻繁に使われています。この2つの方法は、スペクトルの微分を元に自動的にアンカーポイントを見つけるので便利です。基線がおおよそ定数である場合、**一次微分**と**二次微分**の方がより強力ですが、それ以外の場合は**二次微分**を使用します。この例では、基線は曲線を描くため、**二次微分**をアンカーポイントを探す方法として選択します。

アンカーポイントを見つけるにある他の手法や関連するスムージングパラメータについては、次のリンクを参照してください。

[基線モードページ](#)

基線モード ユーザー定義 ▼

スペクトルにスナップする

☐ 基線アンカーポイント

☐ アンカーポイントを見つける

方法 2次導関数
 一時微分と二次微分
 検索のスクリプトを使用
 既存データセットを使用

隣接平均法のスムージングが使用されています。

スムージングウィンドウのサイズ 3 自動

しきい値 0.05 自動

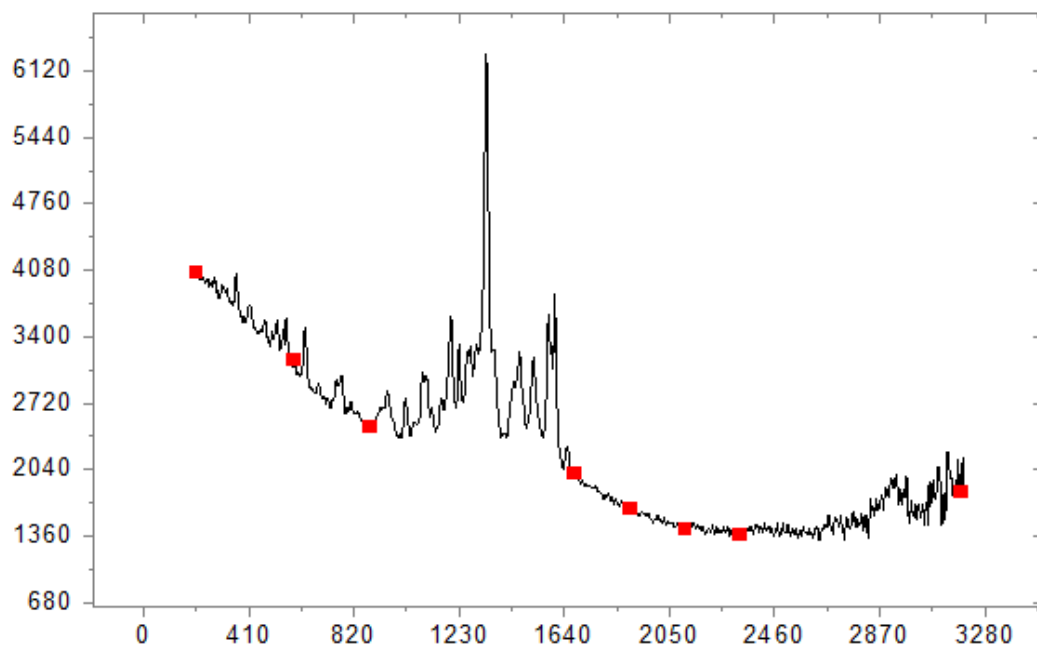
現在のポイント数 8

自動検索をオン

検索するポイント数

検索

5. 「基線アンカーポイント」グループで、**検索**ボタンをクリックします。プレビューウィンドウでアンカーポイントをプレビューできます。



6. **進む**をクリックして**基線の作成**ページに移動します。**接続線**ドロップダウンリストでは**補間**を選択します。**補間手法**のグループではラジオボタンで**スプライン**を選択します。スペクトルはプレビューウィンドウで確認できます。最後に**完了**ボタンをクリックして基線データを入手しましょう。

接続線 補間

スペクトルにスナップする

基線アンカーポイント 追加 変更/削除

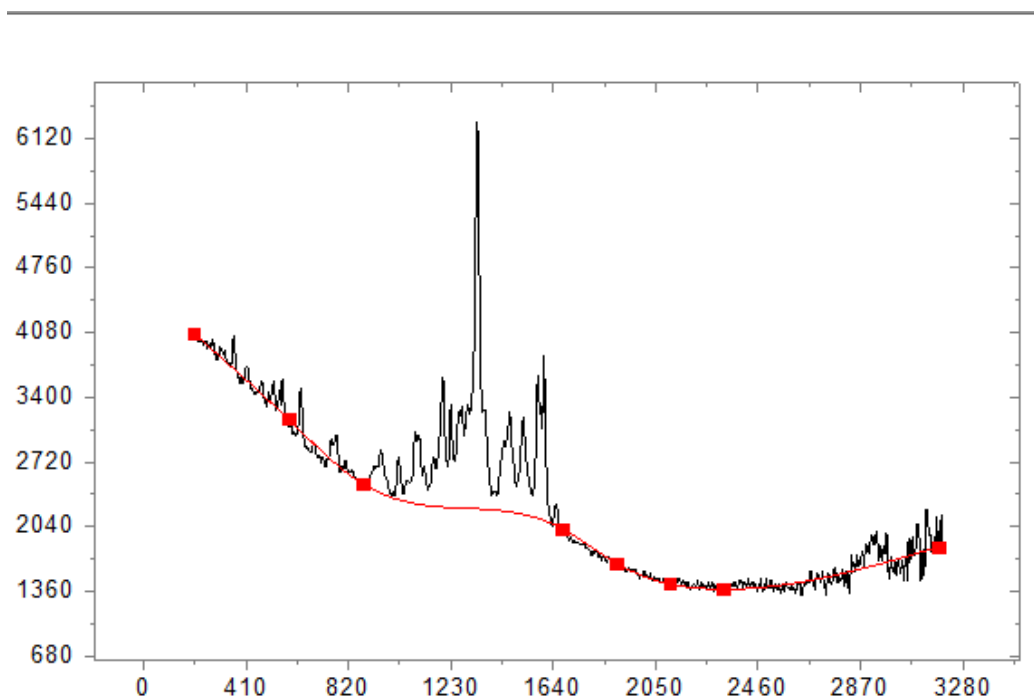
基線の生成ポイント 1501 入力と同じ

補間手法

線

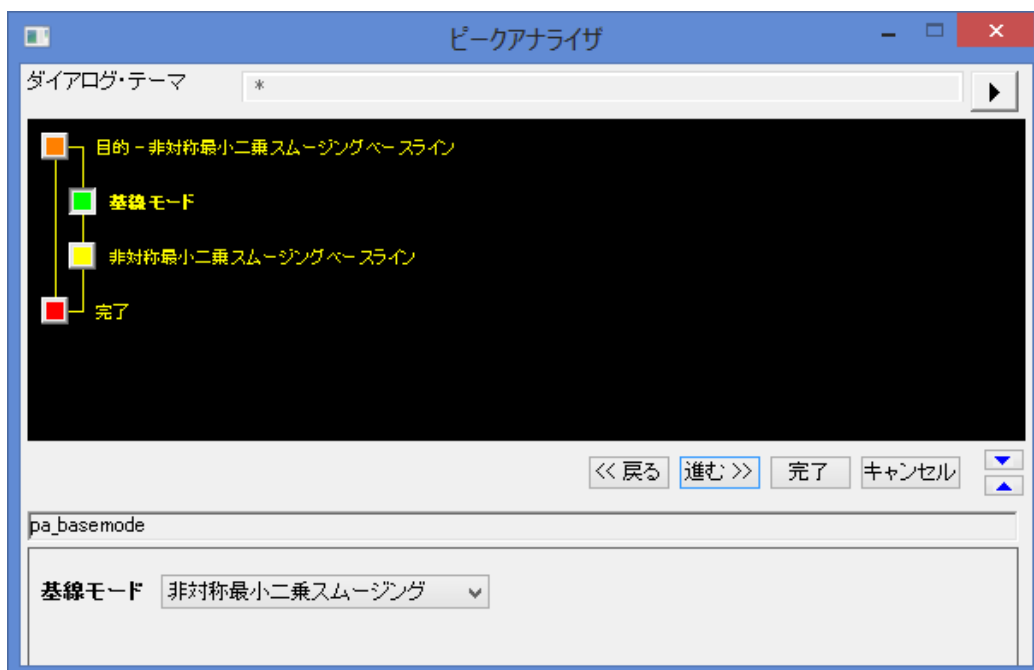
スプライン

B-スプライン

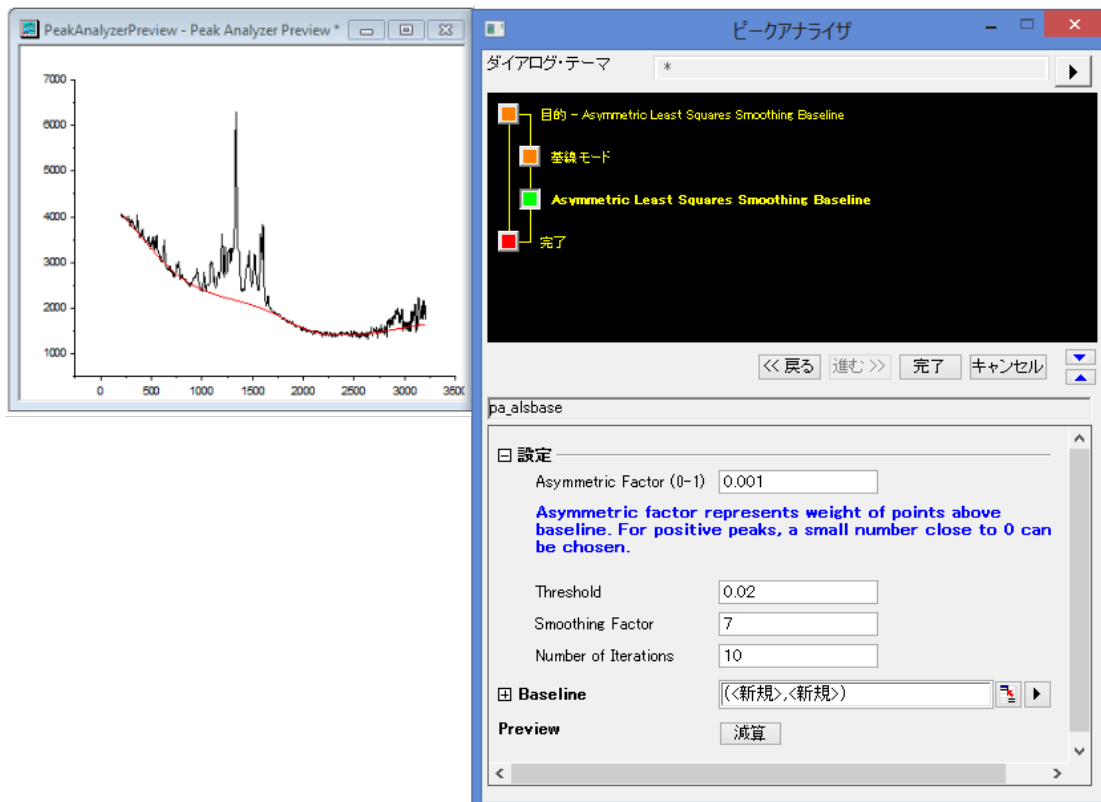


ALS 方式での基線の追加(Pro)

1. 基線モードのページからスタートし、基線方式で **Asymmetric Least Squares Smoothing Baseline (ALS)** を選択します。ALS 基線アンカーポイントを事前を選択する必要なく、わずかなパラメーターだけで簡単に調整することが出来ます。

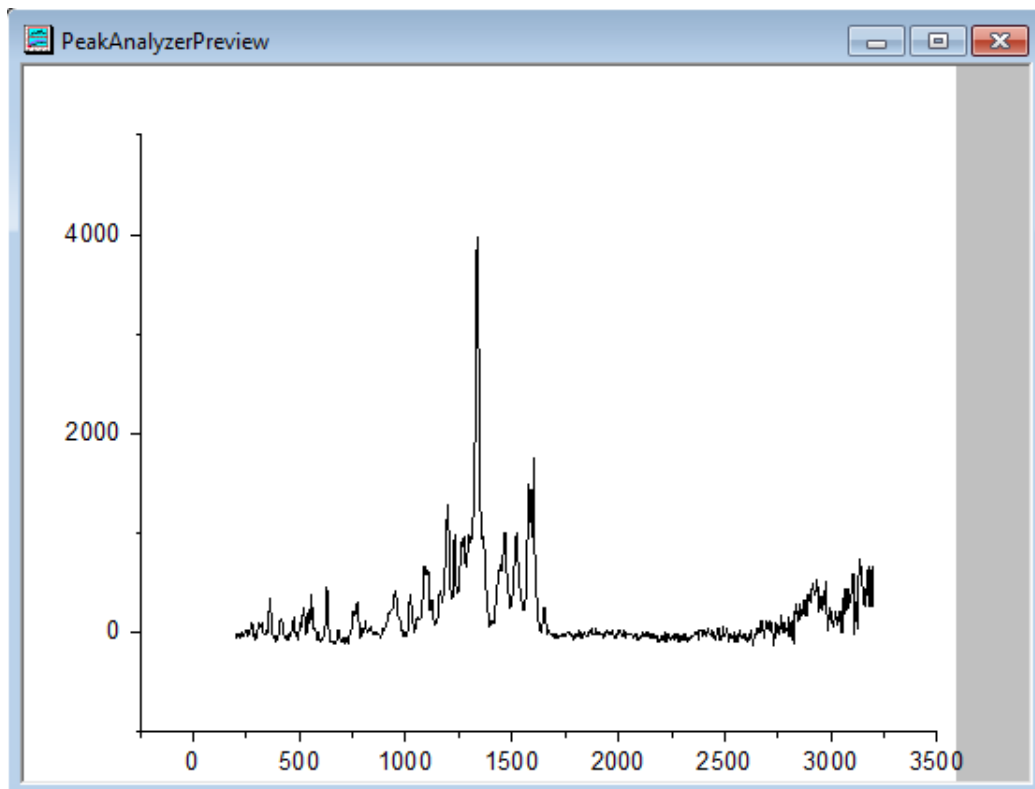
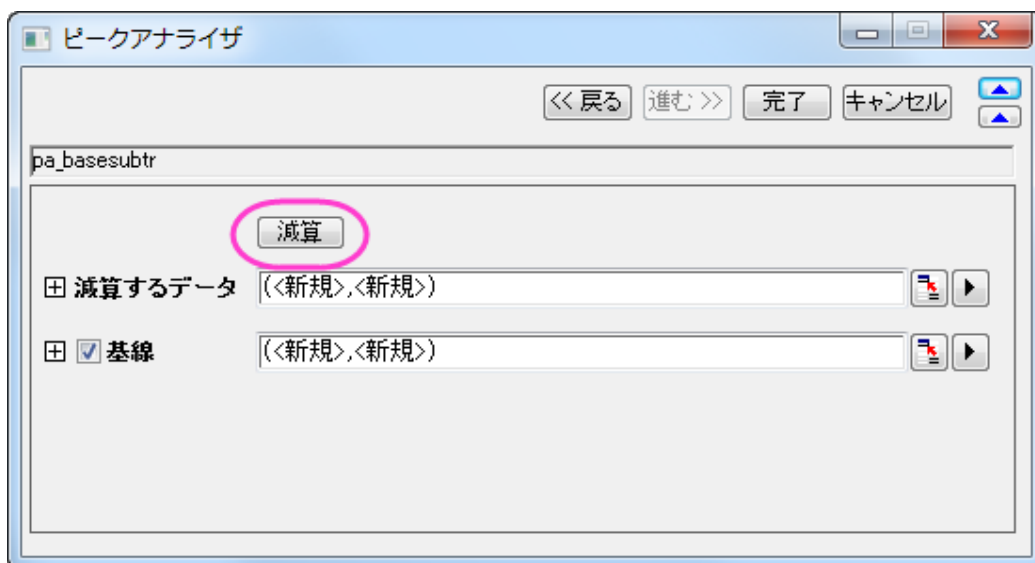


2. **Asymmetric Least Squares Smoothing Baseline** のページで進むをクリックし、基線を最適化するためにパラメーターを調整します。結果テーブルとグラフを出力するために **Finish** ボタンをクリックします。



スペクトルデータから基線の減算

1. 基線を減算したい場合、一番最初のゴールページで**基線の減算**を選択してください。
2. 基線を作成した後、**基線の減算**ページで**進む**ボタンをクリックします。
3. **減算**をクリックすると基線を減算したスペクトルデータを見ることができます。このまま完了をクリックすると基線のデータと減算したスペクトルデータが出力されます。以下の画像は基線の減算ページと基線を減算したときのスペクトルデータです。





4.4.2. ピークアナライザで基線のアンカーポイントを検索するスクリプトを使用する

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ステップ](#)
 - [3.1 ユーザ定義のスクリプトで基線を作成](#)

サマリー

OriginPro では、ピークアナライザを使って、基線の作成または減算オプションを実行することができます。最初に基線のアンカーポイントを検索し、補間またはフィッティングにより検索したアンカーポイントを接続して、基線を作成します。基線のアンカーポイントの検索には、ビルトインの方法または、ユーザが作成した LabTalk スクリプトにより定義します。

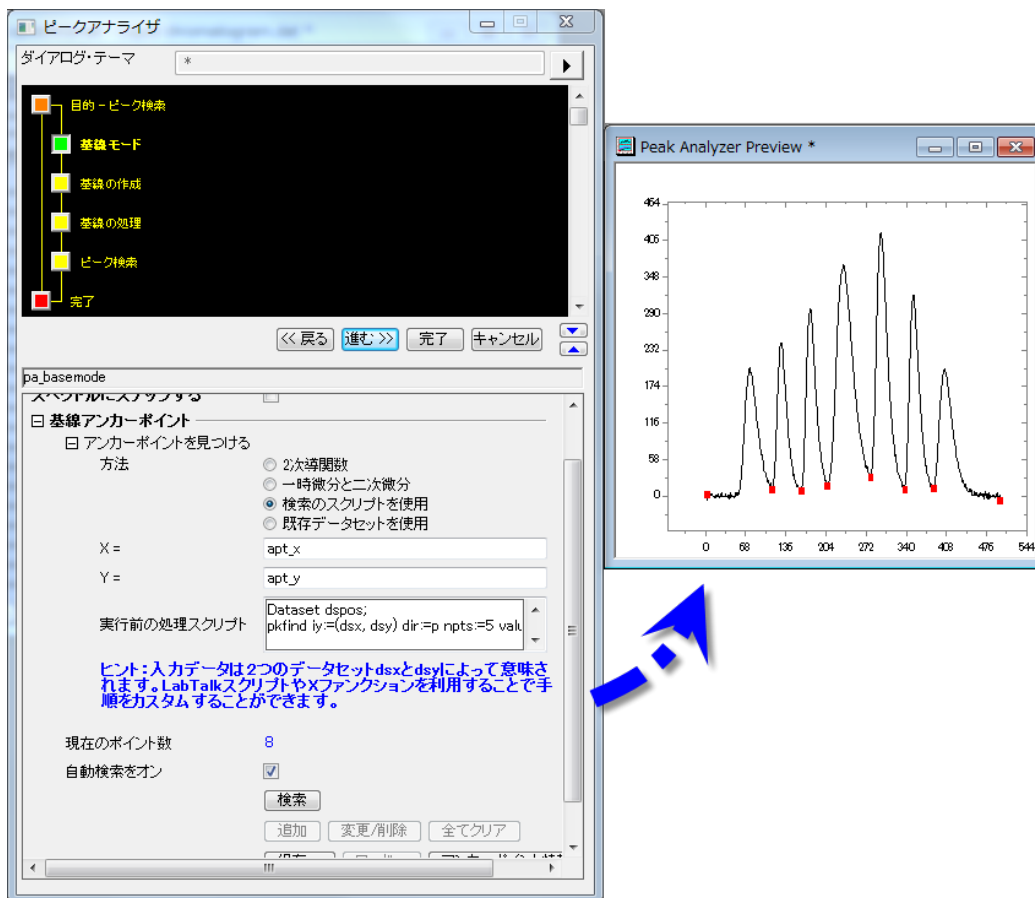
学習する項目

- ユーザ定義のスクリプトで基線を作成する方法
- ユーザ定義の基線からピークを検出する方法

ステップ

ユーザ定義のスクリプトで基線を作成

1. 新しいワークブックを開き、<Origin EXE Folder>\Samples\Spectroscopy\Chromatography\Liquid chromatogram.dat ファイルをインポートします。2 列目を選択します。メインメニューで、**解析:ピークと基線:ピークアナライザ**を選択してピークアナライザのダイアログを開きます。
2. **処理** の項目を**ピーク検索** に設定し、**次へ** ボタンをクリックして**基線モード** ページに移動します。
3. **基線モード** を **ユーザ定義** に設定し、**基線アンカーポイントノード** で、**アンカーポイントを見つけるのオプションを検索のスクリプトを使用** に設定します。
4. apt_x と apt_y を $X=$ と $Y=$ の編集ボックスにそれぞれ入力します。次に、下のスクリプトを**実行前の処理スクリプト** ボックスに入力し、**検索** ボタンをクリックして、スクリプトを実行します。検出された基線のアンカーポイントは、プレビューウィンドウに表示されます。



```

Dataset dspos;
pkfind iy:=(dsx, dsy) dir:=p npts:=5 value:=200 ocenter:=dspos; // 主ピーク位置を検出
int npk=dspos.GetSize(); // 主ピークの数を取得
// アンカーポイントを入力したデータセットを作成
int nn = dsx.GetSize(); // X数のソースを取得
dataset apt_x, apt_y; // アンカーポイントを入力したデータセットを作成
apt_x.SetSize(npk+1); // アンカーポイントの数を設定
apt_y.SetSize(npk+1);
apt_x[1] = dsx[1]; // 1 番目のアンカーポイントとして、1 番目のデータポイントを設定
apt_y[1] = dsy[1];
apt_x[npk+1] = dsx[nn]; // 最後のアンカーポイントとして、最後のデータポイントを設定
apt_y[npk+1] = dsy[nn];
for (ii=1; ii<=npk; ii++)
{
int istart = dspos[ii]; // ii 番目のピークの行番号を取得
int iend = dspos[ii+1]; // 次のピークの列番号を取得
range rtemp = [?!dsy[$(istart):$(iend)]; // 自由データセットに範囲とポイントを宣言
limit rtemp; // サブレンジの統計値を取得
int ind = limit.imin; // 最小 Y 行の行番号を取得
apt_y[ii+1]=limit.ymin; // アンカーポイントとして 2 つのピーク間の最小 Y を取得
apt_x[ii+1]=dsx[ind];
};

```

スクリプトでは、まず全ての主なピーク位置を検索し、隣接する2つのピーク間全てでの最小値を基線のアンカーポイントとして扱います。さらに、データポイントの最初と最後を基線のアンカーポイントに加えます。

Note: **自動検索をオン** のチェックボックスからチェックを外して、**追加** または **編集/削除** を使って基線のアンカーポイントを追加/削除が出来ます。

5.進む ボタンをクリックして、**基線の作成** ページに進みます。**接続線は補間**が選択され、**補間方法は線**を選択してください。**完了**をクリックして、個々のピークに対する適切な基線を取得します。



4.4.3. 各工程の前にスクリプトを使用したテーマによるバッチピーク解析

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ステップ](#)
 - [3.1 テーマとして解析の設定を保存](#)
 - [3.2 ピークデータの 前処理するためのスクリプトを準備](#)
 - [3.3 解析テーマを使ったデータセットのバッチ分析](#)

サマリー

Origin は **解析テーマ** を使用した、複数のデータセットのバッチピーク解析を行うことが出来ます。例えば、各プロセスの前に指定されたスクリプトを使用してピーク分析を行うために、実際にそれを入力する前に、不要なデータセットを除外することができます。

必要な Origin のバージョン: Origin 2016 SR0 以降

学習する項目


このチュートリアルでは、以下の項目について解説します。

- バッチピーク解析のためのテーマとして、解析の設定を保存する。
- データの前処理をそれぞれ行う前に、スクリプトを記述する。
- 解析テーマを使ったバッチピーク解析

ステップ

テーマとして解析の設定を保存

このチュートリアルは、チュートリアルデータプロジェクト(<Origin EXE フォルダ>\Samples\TutorialData.opj)と関連しています。

1. **Tutorial Data.opj** を開き、プロジェクトエクスプローラー (PE) に表示されている **Script Before Process in Batch PA** フォルダを開きます。
2. ワークブックにある **Data1** ワークシートをクリックします。**B** 列を選択し、**解析:ピークと基線:ピークアナライザー** をクリックします。最後に**ピークフィット(Pro)**を選択します。
3. 進むのボタンをクリックし、基線モードを無し(**Y=0**)に設定します。進むボタンを 2 回クリックし、**ピークフィット(Pro)** のページに移動します。結果の下にある**グラフ構成の設定**を開き、**レポートグラフの作成**で<なし>を t 選択し、解析処理をスピードアップするために、レポートグラフの作成を行わない設定にします。
4. **ダイアログテーマ**の隣にある  ボタンをクリックして、**名前を付けて保存...**を選択し、**名前を付けてテーマを保存**のダイアログを開きます。**テーマ名**の編集ボックスで、**MyPeakAnalysis** を入力し、**OK** ボタンをクリックして保存します。
5. **完了**ボタンをクリックし、解析を実行して結果を出力します。

ピークデータの前処理するためのスクリプトを準備

テーマを使ったバッチピーク解析 ダイアログには、各プロセス前及び各プロセス後、終了時にスクリプトを実行できるように、3 つの編集ボックスが作られています。このセクションでは、ピークデータを前処理するために、各プロセスの前にスクリプトを記述する方法を主に説明します。

1. ワークシート **Data1** を再度アクティブにします。各データセットのスパークラインから、いくつかのピークデータ、例えば **C** 列、**E** 列、**F** 列に多くのノイズがあることが分かります。ノイズが特定のレベルに達している場合、このようなノイズを除去します。
2. この方法は、次のルーチンで行われるこのチュートリアルでは、データのノイズが大きいかどうかを認識していました。
 - データから高い周波数のノイズを取得するための、ハイパス FFT フィルタで生データにフィルタをかけます。
 - ノイズと対応する生データの標準偏差(SD)を確認します。
 - 生データの SD の二乗以上のノイズの SD の二乗の割合が 30%を超える基準を設定します。それはノイズデータと考えられ、バッチ解析から除外されます。
3. 上記のルーチンに従った、ノイズデータを事前に除外するスクリプトは次の通りです。

```
dataset dr;
fft_filters iy:=_ry filter:=high oy:=dr; // ノイズを取得するためにハイパスフィルタを実行
stats dr;
double nSD = stats.sd; // Calculate SD of noise
stats _ry;
double sSD = stats.sd; // 素データの SD を計算

if (nSD^2/sSD^2>0.3) // ノイズの識別基準を設定
    _skip=1;
else
    _skip=0;
```


`_ry` は、現状の y データを参照し、`_skip` は現状のデータセットをスキップするかどうかを決定します。

解析テーマを使ったデータセットのバッチ解析

1. ワークシート **Data1** をアクティブにし、シート中の全ての列を選択して、**解析:ピークと基線::分析テーマを使ったバッチピーク解析** を選択して、ダイアログを開きます。
2. **分析テーマ**のドロップダウンリストから **MyPeakAnalysis** を選択し、**結果シート**のドロップダウンリストから、**ピーク属性(Pro)** を選択します。
3. 特定のシートに結果を出力するには、**出力シート**の編集ボックスに、範囲をシンタックスで入力します。**MySummary** ブックの **MyResults** ワークシートに出力するには、**[MySummary]MyResults!** と編集ボックスに入力します。
4. スクリプト欄内の上側にある、**各プロセス前のスクリプト**に記述したスクリプトノードを入力します。

分析テーマによるバッチピーク解析(B): paMultiY

ダイアログ・テーマ: *

説明: 分析テーマを使ってピーク解析のバッチ処理をし、サマリーレポートを作成します

田入力: s1((A,B),(A,C),(A,D),(A,E),(A,F),(A,G),(A,H))

分析テーマ: MyPeakAnalysis

結果シート: ピーク属性 (Pro)

レポート中にフィット統計を含める:

結果シートの内容は以下に示す別のブックの出力シートに追加されます。

出力シート: [MySummary]MyResults!

中間解析出力の削除:

日オプション

データセット識別子: 範囲

Designation: <自動>

出力シートの開始行: 1

開始時に出力シートをクリア:

ラベル行の追加 (最初のファイル):

追加モード: 行 列

日スクリプト

Script Before Each Process: `if(nSD^2/sSD^2>0.3) // ノイズの識別`
`_skip=1;`

各プロセス後のスクリプト:

終了時のスクリプト:

OK キャンセル

5. **OK** をクリックしてバッチピーク解析を実行すると、ノイズの多いデータセットは、除外されて **MyResult** シートに表示されます。

	A(Y)	B(Y)	C	D(Y)	E(Y)	F(Y)	G(Y)	H(Y)	I(Y)	J(Y)
Long Name	Dataset	Peak Index	Peak Type	Area Fit	Area FitT	Area FitTP	Center Max	Center Grt	Max Height	FWHM
Units										
Comments										
Parameters										
1	[Sample]Data1!(A,B)	1	Gaussian	62.965	62.96315	26.83319	1.00146	1.00146	111.9851	0.5282
2	[Sample]Data1!(A,B)	2	Gaussian	#####	#####	52.29279	3.99952	3.99952	#####	0.7740
3	[Sample]Data1!(A,B)	3	Gaussian	48.98016	48.98016	20.87402	6.99981	6.99981	#####	0.2484
4	[Sample]Data1!(A,D)	1	Gaussian	66.69304	66.69304	11.37578	1.2	1.2	#####	0.2873
5	[Sample]Data1!(A,D)	2	Gaussian	#####	#####	30.09463	3.8	3.8	#####	0.3611
6	[Sample]Data1!(A,D)	3	Gaussian	#####	#####	38.35519	6.3	6.3	#####	0.1950
7	[Sample]Data1!(A,D)	4	Gaussian	#####	#####	20.1744	8.8	8.8	#####	0.1950
8	[Sample]Data1!(A,G)	1	Gaussian	93.24854	93.24854	30.21961	1.8	1.8	#####	0.7235
9	[Sample]Data1!(A,G)	2	Gaussian	#####	#####	39.84866	5	5	#####	0.6582
10	[Sample]Data1!(A,G)	3	Gaussian	92.36032	92.36026	29.93173	8	8	89.14607	0.9731
11	[Sample]Data1!(A,H)	1	Gaussian	#####	#####	45.4566	2.49826	2.49826	#####	0.5965
12	[Sample]Data1!(A,H)	2	Gaussian	#####	#####	54.5434	7.50242	7.50242	#####	0.9573



4.4.4. クイックピークガジェットとピークアナライザを組み合わせる使用

サマリー

クイックピークガジェットはピーク解析を直感的に行う事ができ、ピークアナライザはピーク検索やピークフィットの詳細設定が可能です。例えば、最初にクイックピークガジェットでピークを探し、それからピークアナライザでピークの解析を行う事ができます。設定全体をピークアナライザでテーマとして保存すれば、後にバッチ処理に活用できます。

必要な Origin のバージョン: OriginPro 9.0 SR0 以降


学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について解説します。

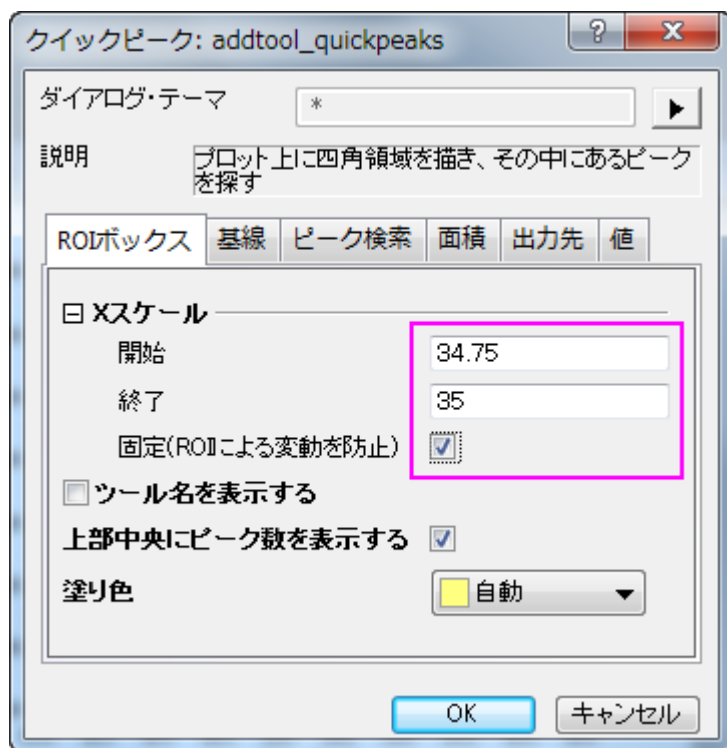
- クイックピークガジェットを使ってピークを検索する
- クイックピークガジェットからピークアナライザを開く
- クイックピークガジェットで見つけたピークをピークアナライザで詳しく分析する

ステップ

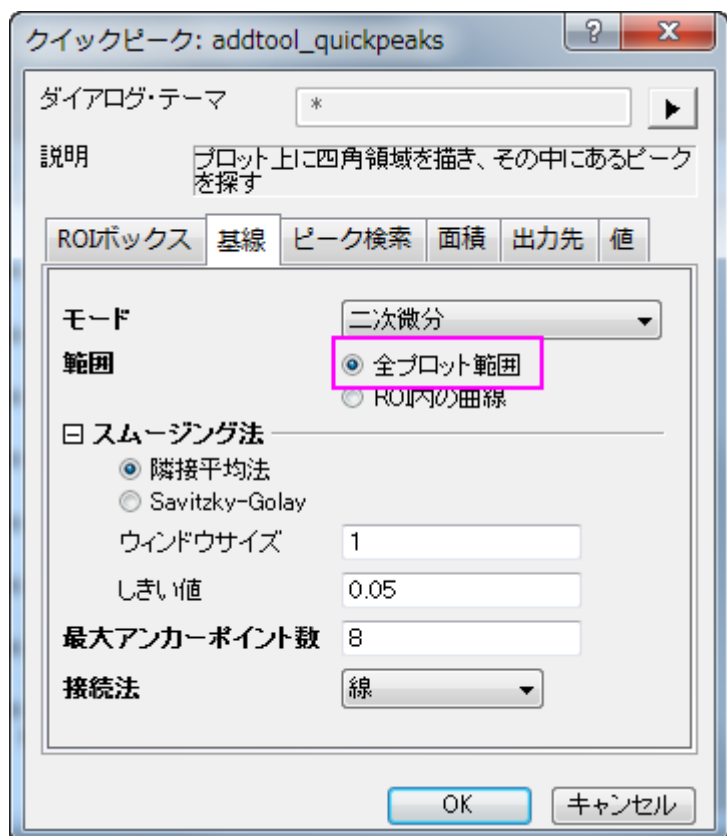
このチュートリアルは、チュートリアルデータプロジェクト(<Origin EXE フォルダ>\Samples\TutorialData.opj)と関連していません。

- TutorialData.opj** を開き、プロジェクトエクスプローラで **Quick Peaks Gadget** フォルダを開きます。
- Nitrate** ワークシート内にある全ての列を選択し、2D グラフギャラリーツールバーの  ボタンをクリックして折れ線グラフを作成します。
- 作成されたグラフウィンドウをアクティブにし、**ガジェット:クイックピーク**と選択します。

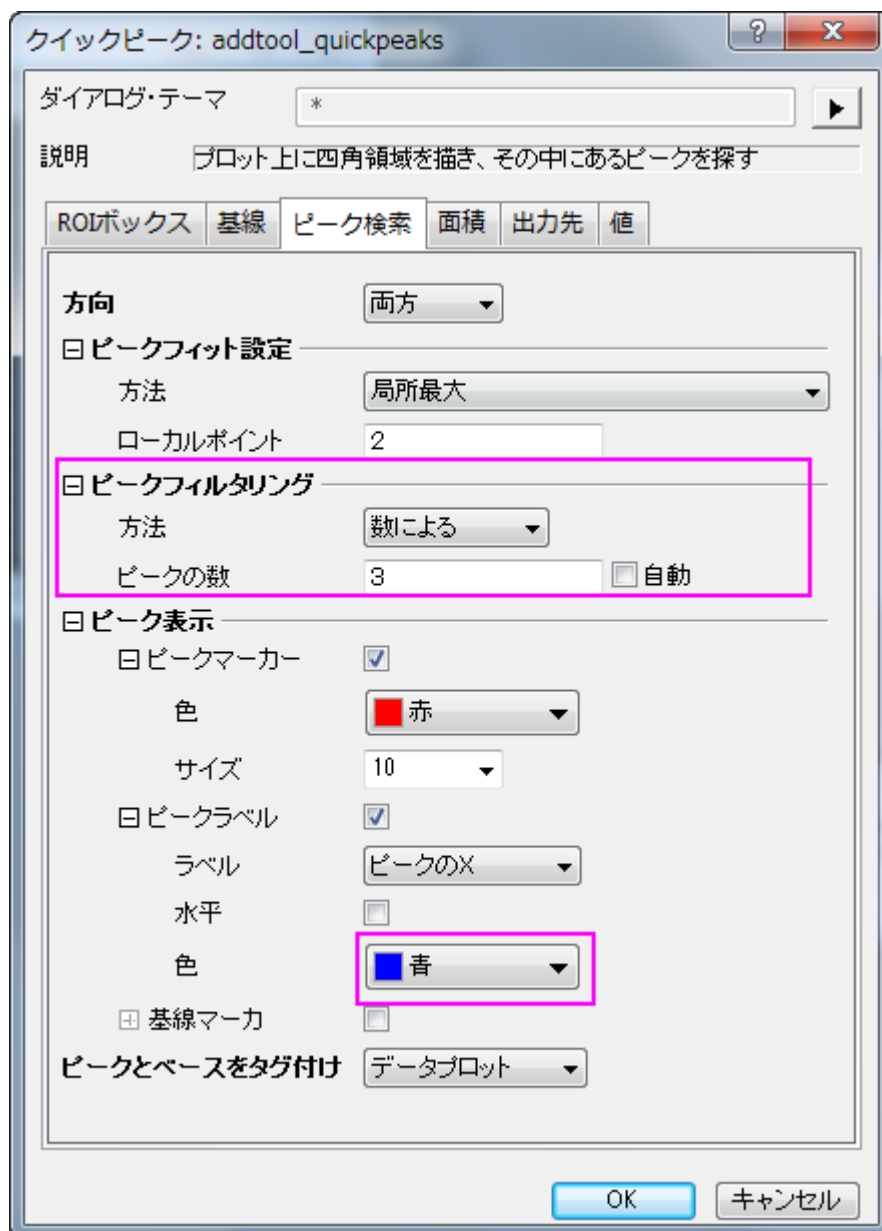
4. ROI ボックスタブで、X スケールの開始と終了の値をそれぞれ 34.75 と 35 に設定し、固定(ROI による変動を防止)にチェックを付けます。



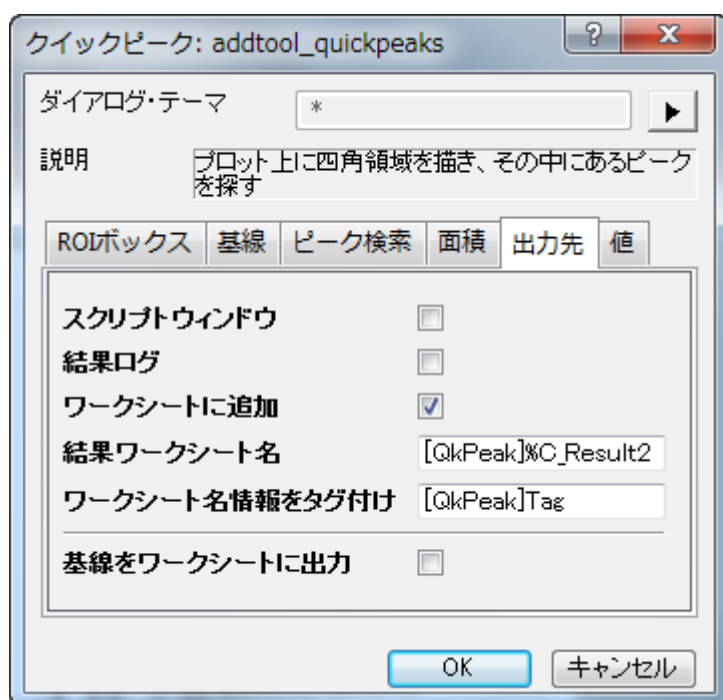
5. 基線タブを開いて、範囲から全プロット範囲のラジオボタンを選択します。



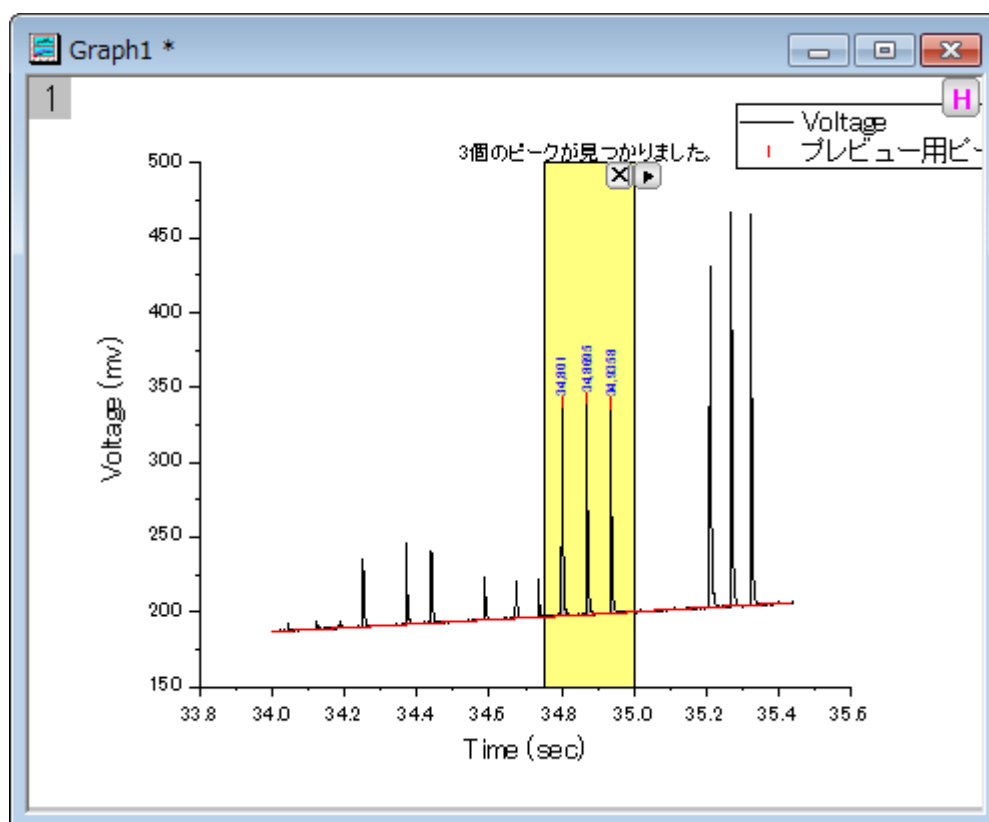
6. ピーク検索タブでは、ピークフィルタリングの方法で数によるを選択し、ピークの数に3を設定します。ピークラベルの色を青に設定します。




7. 出力先タブでは結果ワークシート名を[QkPeak]%C_Result2に変更します。

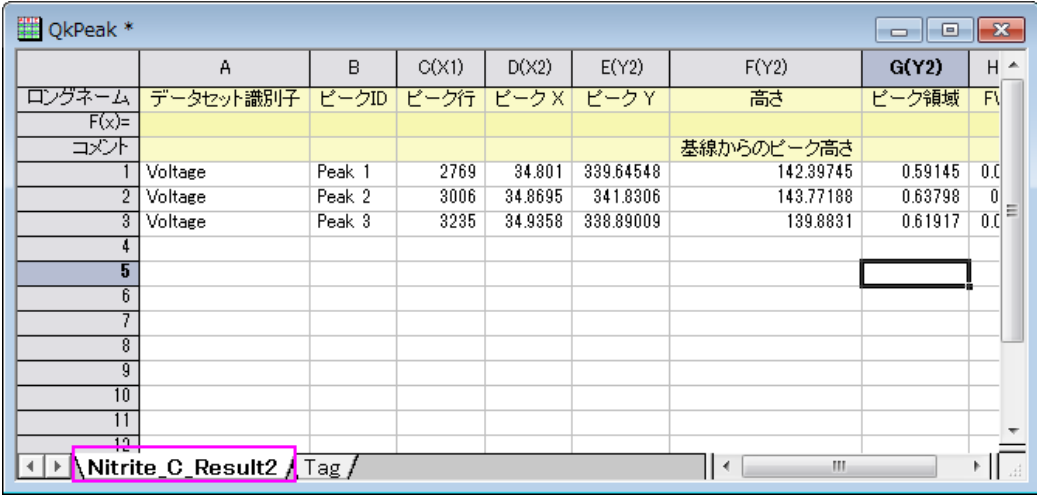


8. 値タブでは出力する値を指定できます。ピーク ID、ピーク X、ピーク Y、高さ、ピーク領域、FWHM のチェックのみを残して他のチェックは外します。OK をクリックすると、ガジェットがプロットに追加されます。



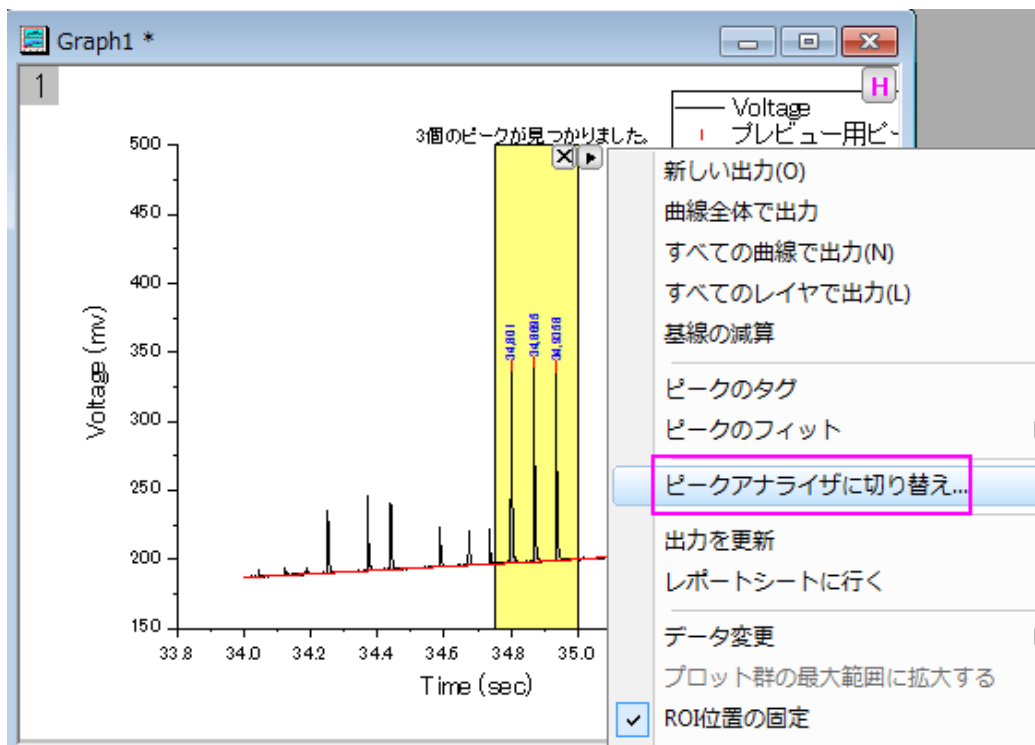
9. ROI ボックスの右上にある矢印ボタン  をクリックして新しい出力を選び、レポートシートを生成します。

10. もう一度同じ方法でコンテキストメニューを開き、今度はレポートシートに行くを選択してレポートシートを開きます。




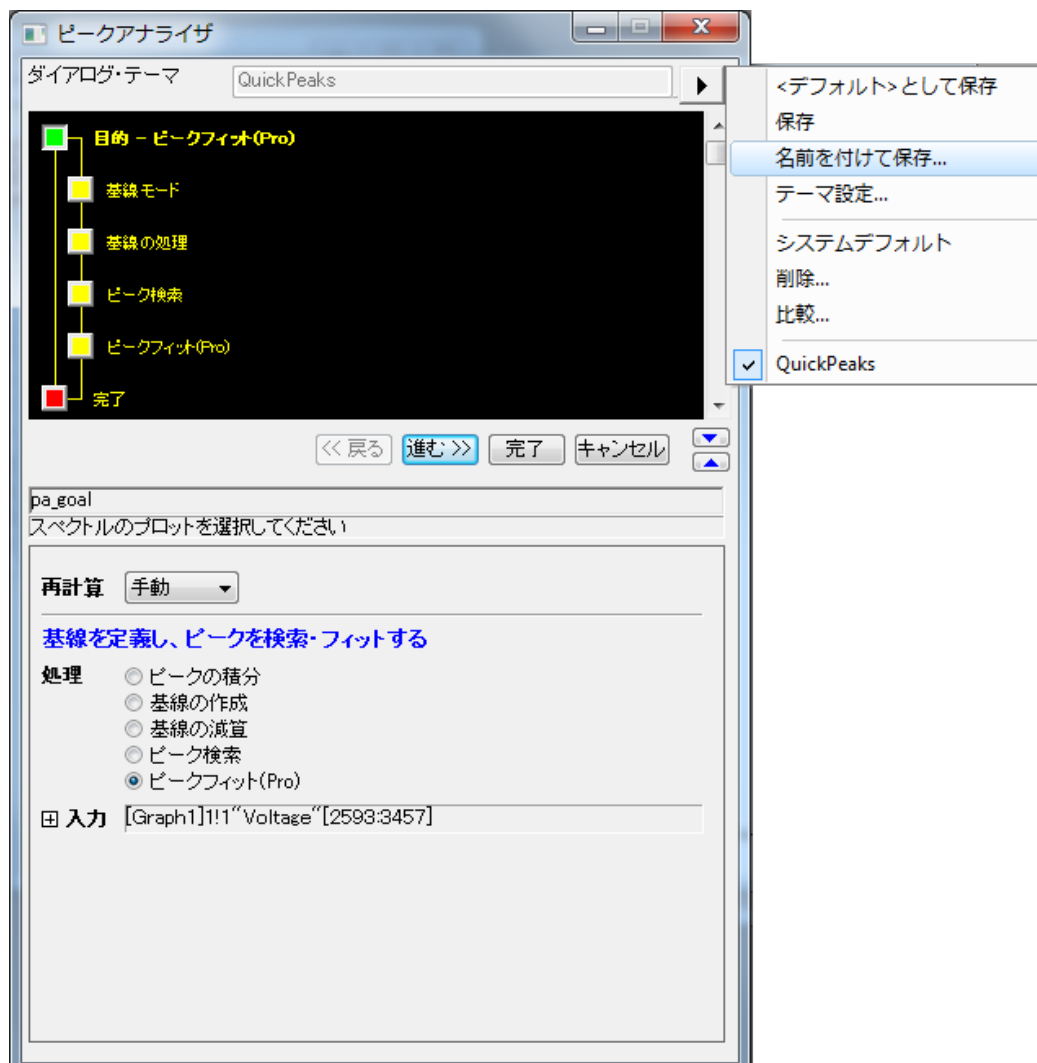
	A	B	C(X1)	D(X2)	E(Y2)	F(Y2)	G(Y2)	H
ロングネーム	データセット識別子	ピークID	ピーク行	ピーク X	ピーク Y	高さ	ピーク領域	FWHM
F(x)=								
コメント						基線からのピーク高さ		
1	Voltage	Peak 1	2769	34.801	339.64548	142.39745	0.59145	0.0
2	Voltage	Peak 2	3006	34.8695	341.8306	143.77188	0.63798	0
3	Voltage	Peak 3	3235	34.9358	338.89009	139.8831	0.61917	0.0
4								
5								
6								
7								
8								
9								
10								
11								
12								

11. では、ピークアナライザを開いてピークフィットを続けて行きましょう。コンテキストメニューを開き、ピークアナライザに切り替えを選びます。



12. ピークアナライザが開くと、ピークフィットのゴールは既に選択されており、基線モードとピーク検索の方法はクイックピークガジェットの設定を引き継いでいる事がわかります。
13. ピークのフィットページに直接行き、フィット実行ボタンをクリックして、先程見つけた3つのピークをガウス関数でフィットします。

14.  ボタンをクリックして、コンテキストメニューから名前を付けて保存を選択し、テーマ名を **MyQuickPeaks** として保存します。



15. ピークアナライザでは完了ボタンをクリックしてピークフィット結果を生成します。

Notes: 保存したテーマはバッチ処理でピーク解析を行う時に使用できます。**解析:ピークと基線:テーマを使ったピーク分析のバッチ処理**を選び、**paMultiY** ダイアログを開きます。バッチ処理によるピーク解析は、複数の似たようなデータファイルがあるときなどに便利です。詳細は、このサンプルをご覧ください。

4.4.5. ピークの検出

ピークの検出とマーキング

サマリー

ピークアナライザには、自動ピーク検出の方法がいくつかあります。また、ユーザは手動でピークを追加、削除、修正することができます。

ピークが検出されると、ピークの中心位置を示すため、ラベルがピークの中心に付加されます。

必要な Origin のバージョン:8.0 SR6

学習する項目

- ピークアナライザの自動ピーク検出の使用およびカスタマイズ方法
- ピークの中心のラベルをカスタマイズする方法

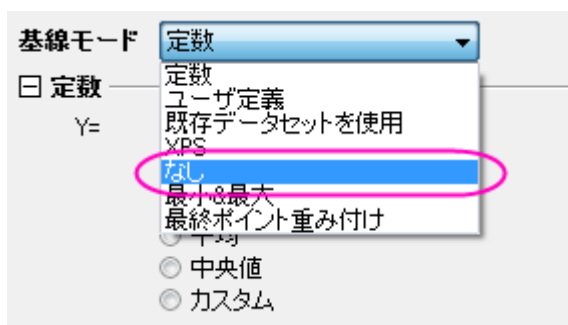
ステップ

1. 新しいワークブックを開き、Samples\Spectroscopy\HiddenPeaks.dat ファイルをインポートします。
2. 2 列目を選択します。
3. 「作図:線図:折れ線」を選択して、折れ線グラフを作成します。
4. グラフをアクティブにして、解析:ピークと基線:ピークアナライザを選択してピークアナライザのダイアログを開きます。
5. 最初のページ(スタートページ)で、ゴールグループのピーク検出ラジオボタンを選択します。そして、「進む」ボタンをクリックして、次のページに移動します。

基線を定義し、ピーク位置を検索・マーク付けをする

- 処理
- ピークの積分
 - 基線の作成
 - 基線の減算
 - ピーク検索
 - ピークフィット(Pro)

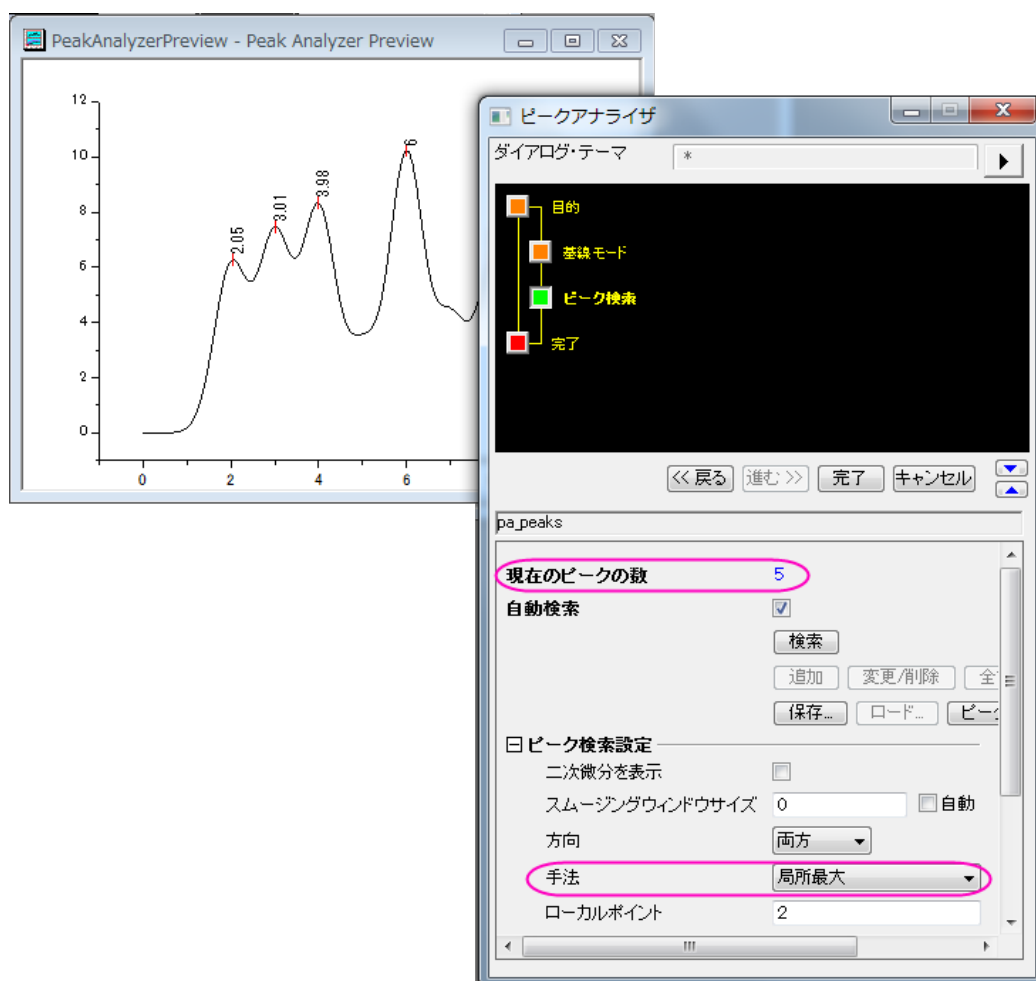
6. 「基線モード」ページで、「基線モード」ドロップダウンリストから「なし」を選びます。



「進む」をクリックし、「ピーク検索」ページに移動します。

7. 「ピーク検索」ページで

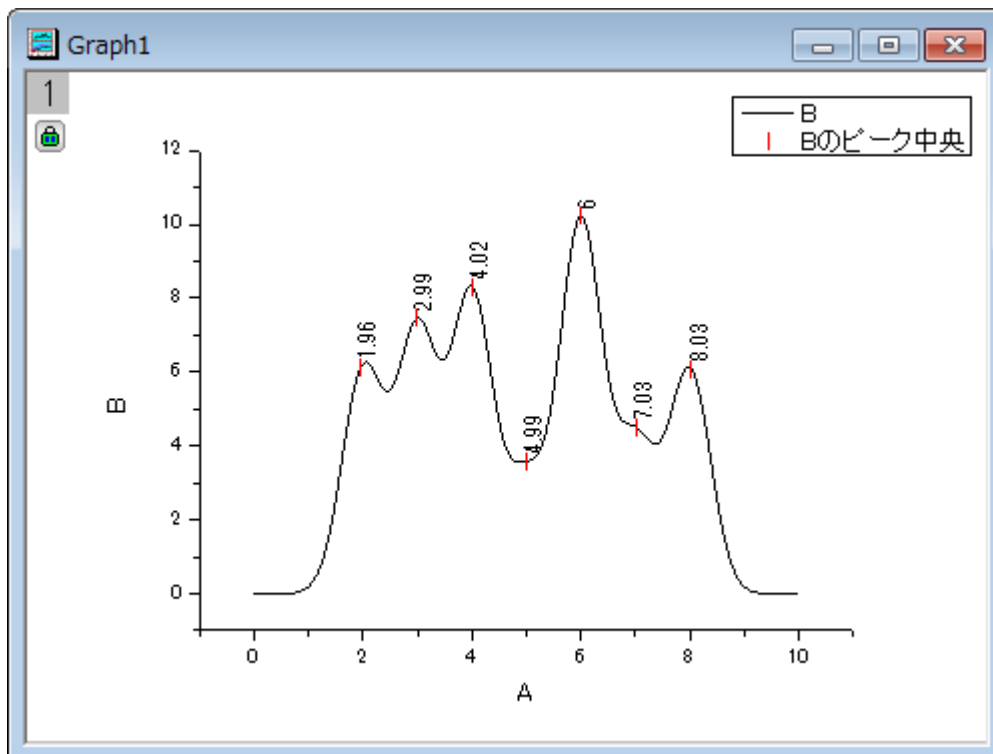
1. 「ピーク検索設定」を開きます。「手法」で「局所最大」が選択されていることを確認します。そして、「検索」ボタンをクリックします。5つのピークが検出されます。



2. 「手法」を「二次微分(隠れたピークの検索)」に変更します。再度、「検索」ボタンをクリックします。今度は、7つのピークが検出されます。



3. 「完了」ボタンをクリックして分析を完了します。最終的に次のようなグラフになります。



4.4.6. ピークの積分

ピークの積分

サマリー

ピークアナライザを使用してピークを積分し、それらの面積を割り出します。

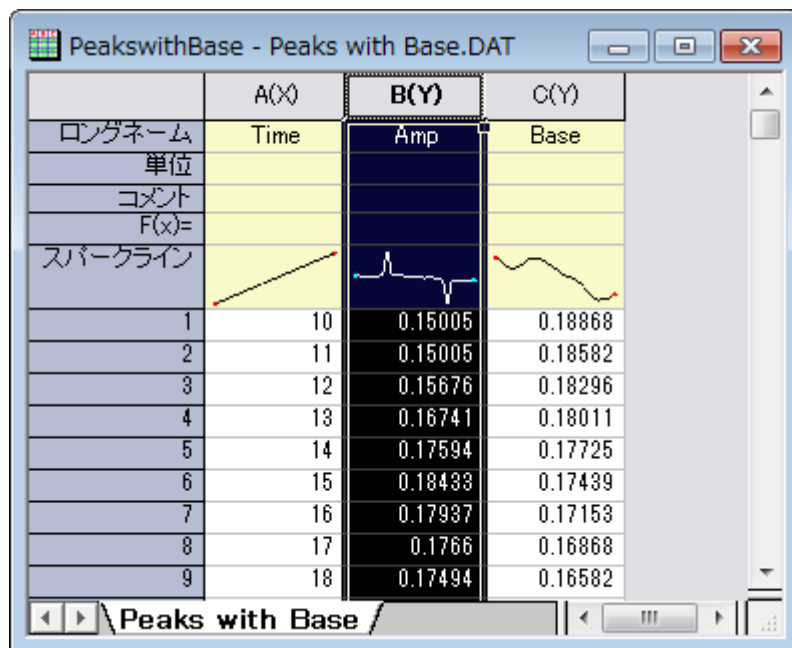
必要な Origin のバージョン: 8.0 SR6

学習する項目

- 既存のデータセットを基線にする方法
- スペクトルデータから基線を減算する方法
- ピークアナライザからピーク面積を計算する方法

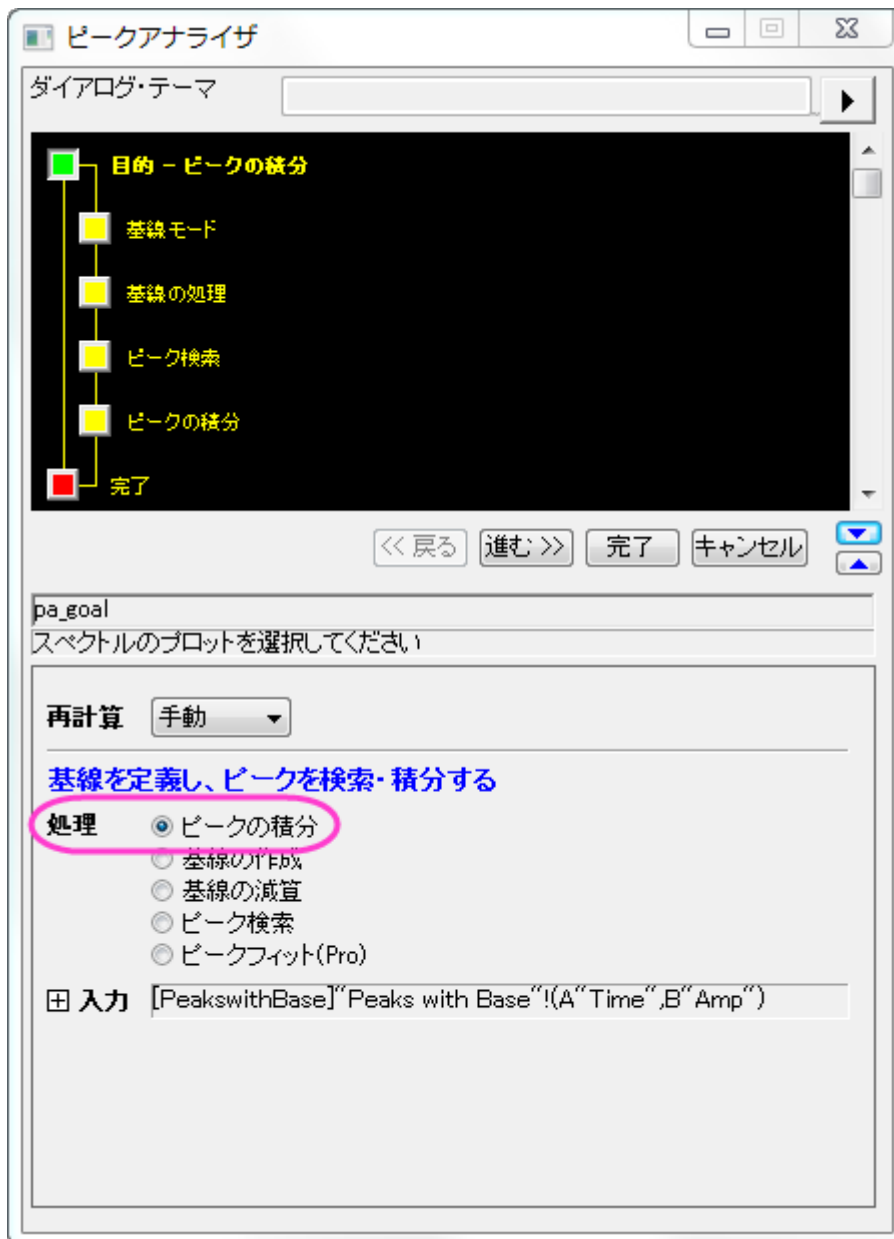
ステップ

1. 新しいワークブックを開き、`\Samples\Spectroscopy\Peaks with Base.DAT` ファイルをインポートします。
2. 2 列目を選択します。



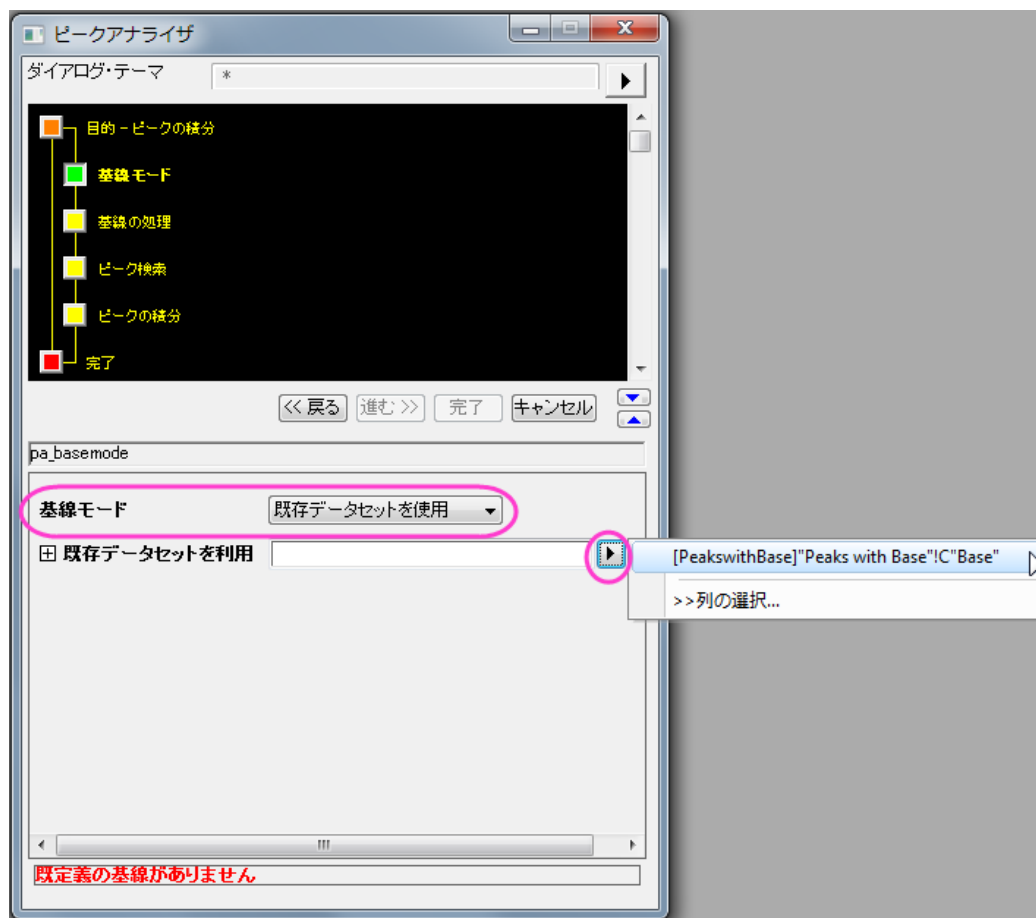
3. メインメニュー内で**解析**をクリックし、**ピークと基線**を指した後に**ピークアナライザ**をクリックします。

4. ピークアナライザの初めのページ(ゴールページ)で処理グループ内のピークの積分を選びます。「進む」をクリックし、「基線モード」ページに移動します。



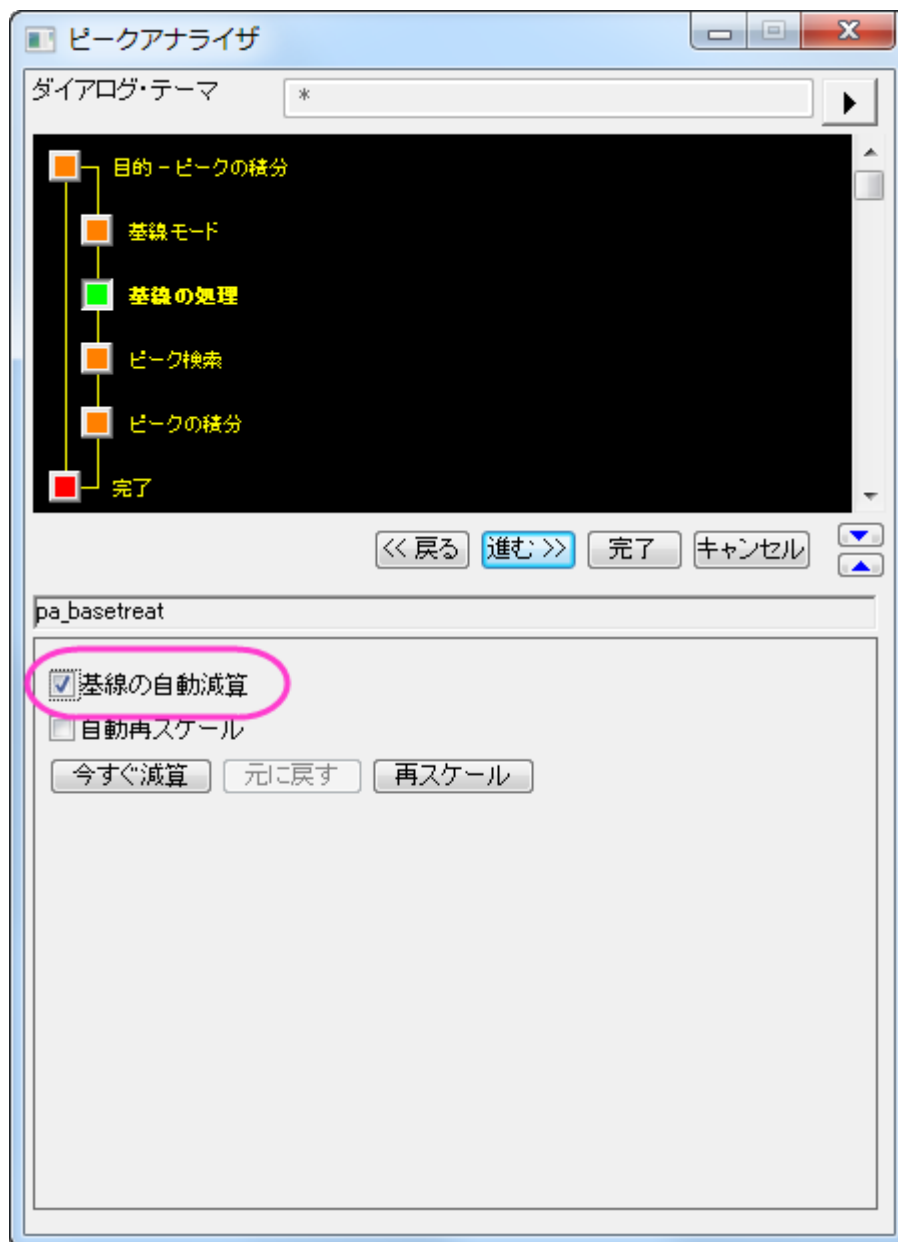
5. 「基線モード」ページで、基線モードドロップダウンリストから既存データセットを使用を選びます。データセットのドロップダウンメニューの右側にある三角形ボタンをクリックし、[PeakswithBase]"Peaks with Base"!C"Base"をフライ

アウトメニューから選択します。「進む」をクリックし、ピークアナライザの「**基線の処理**」ページに移動します。



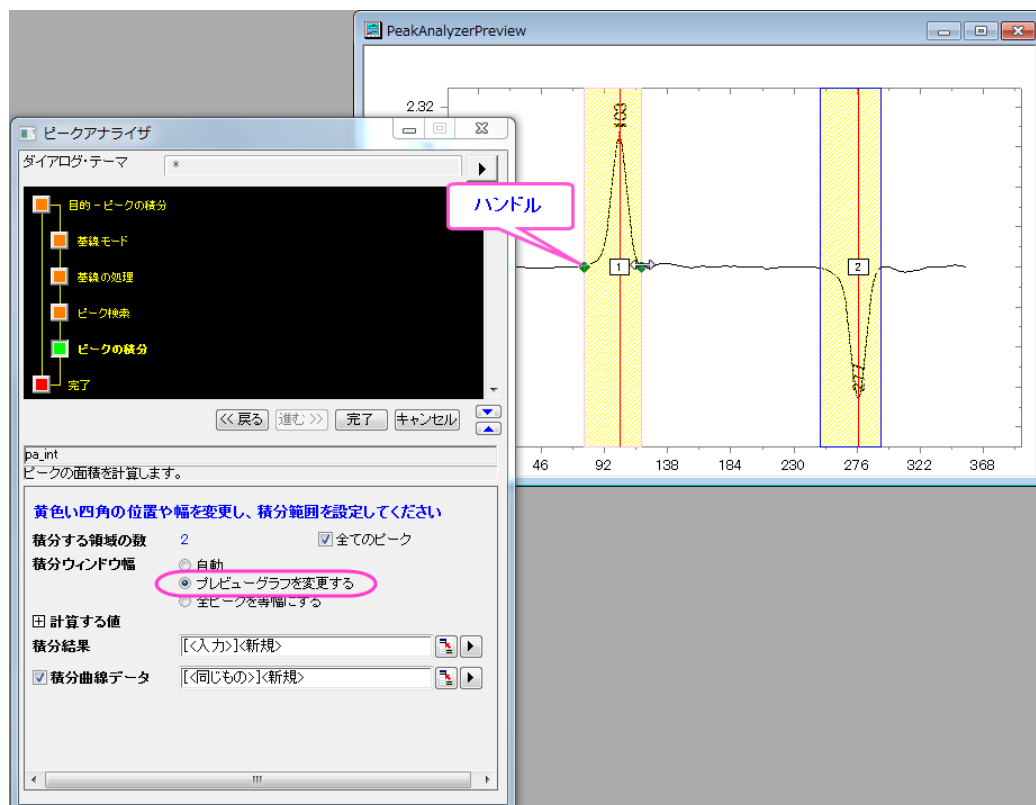
6. 「**基線の自動減算**」チェックボックスを選択します。上段パネルの「**ピークの積分**」アイコンをクリックして**ピークの積分**ページに行きます。(あるいは**進む**ボタンを2回クリックします。)プレビューグラフでは、番号が付いた2つの黄色い

四角形が表示され、デフォルトで検出された2つのピークを示しています。

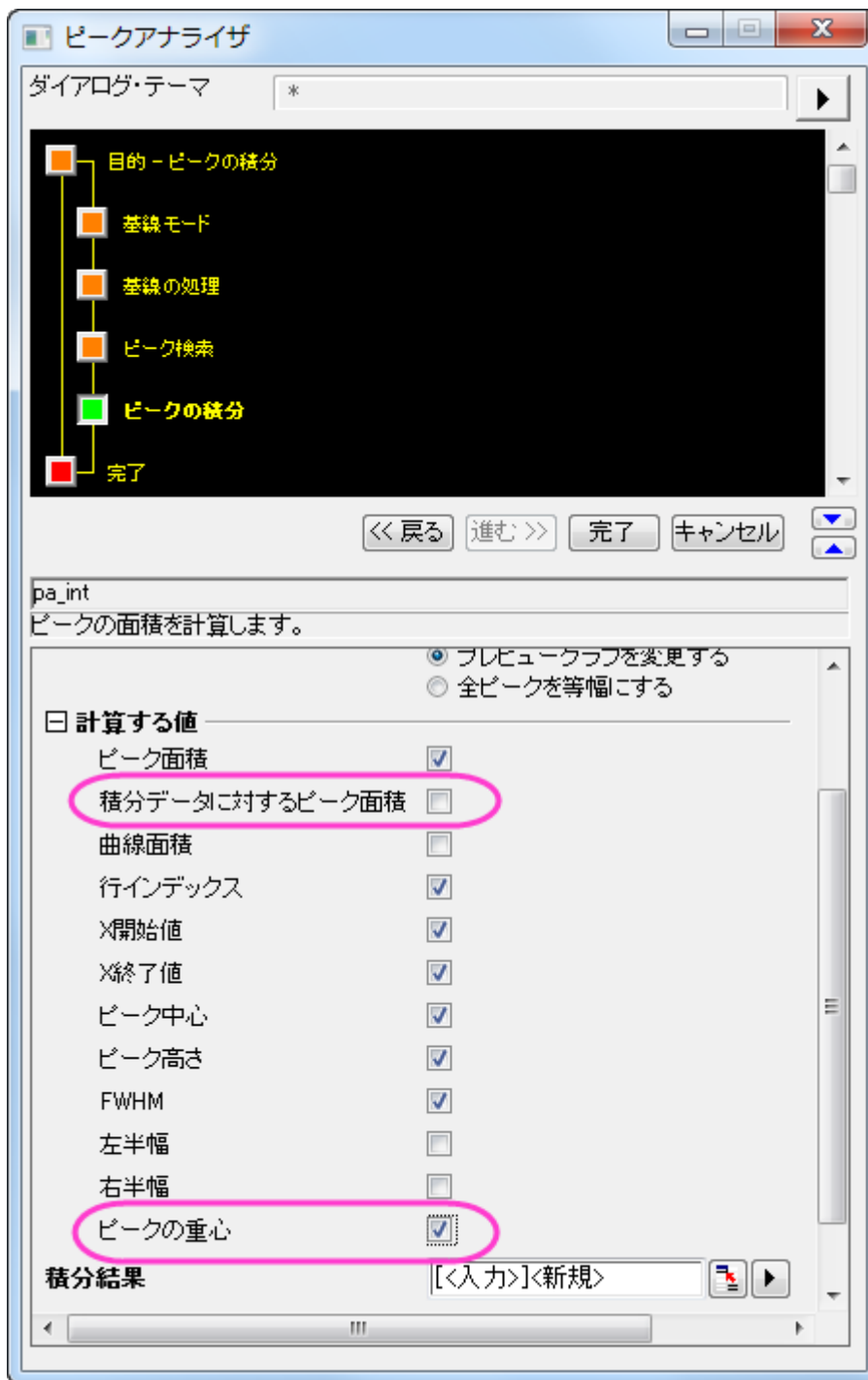


7. 積分ウィンドウ幅では、プレビューグラフを変更するを選択します。グラフ上の1番の四角形の内側をクリックします。1対のハンドルマークが黄色い積分ウィンドウの両端に出現します。このハンドルをドラッグすることで積分が行われ

る範囲を調整します。2番の四角形の内側をクリックし、同じように2つ目のピークについても調整します。



8. ピークアナライザのピークの積分ページで、計算する値グループで希望の項目すべてを選択します。例えば、各ピークを中心を計算するには、「ピーク中心」チェックボックスを選択します。「積分データに対するピーク面積」を出力したくなければ、「積分データに対するピーク面積」チェックボックスのチェックを外します。選択したら、「完了」ボタンをクリックして、分析を実行します。



結果は、*Integration_Result1* というワークシートに出力されます。

ログネーム	A(X)	B(Y)	C(Y)	D(Y)	E(Y)	F(Y)	G(Y)	H(Y)	I(Y)
行番号	Area	Row Index	Beginning X	Ending X	FWHM	Center	Height	Centroid	
積分	"Amp"の積分結果	"Amp"の積分結果	"Amp"の積分結果	"Amp"の積分結果	"Amp"の積分結果	"Amp"の積分結果	"Amp"の積分結果	"Amp"の積分結果	"Amp"の積分結果
モード									
F(X)									
1	1	26.62295	93	77	119	13.16915	103	1.87906	102.12429
2	2	-27.62137	267	249	293	13.28994	277	-1.9043	275.88972
3									

「計算する値」グループで「ピーク面積」にチェックを付けていれば、この結果ワークシートの「Area」列にピークの面積が算出することができます。

4.4.7. ピークフィット

基線と一緒にピークフィットを行う

サマリー

OriginPro では、**ピークアナライザ**を使って、いくつかの基線減算オプションで複数ピークフィットを実行することができます。スペクトルデータの基線を作成するさまざまな方法があります。2,3 のアンカーポイントを選択し、関数でそれらをフィットすることができます。基線のフィットはピークフィット中に行われます。

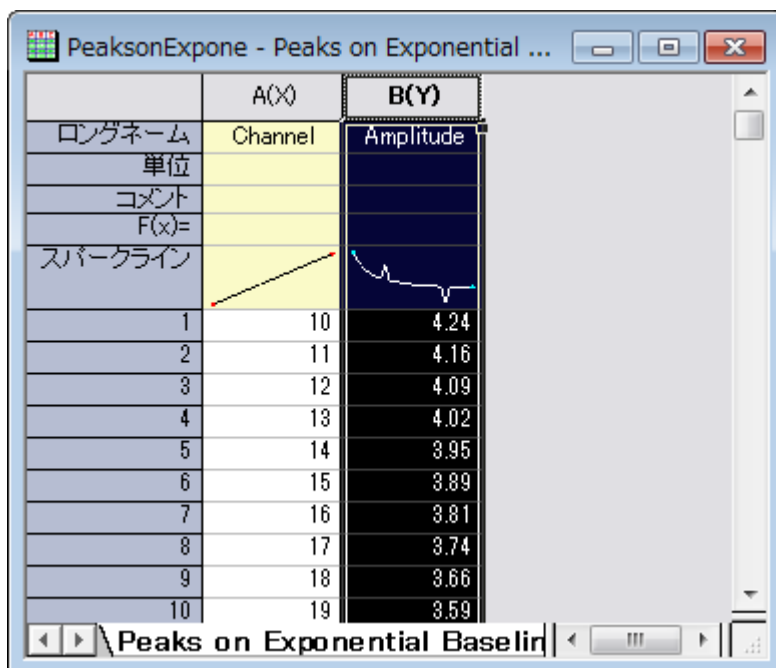
必要な Origin のバージョン: Pro 8.0 SR6

学習する項目

- ピークのフィットを実行する方法
- 基線をフィットする方法

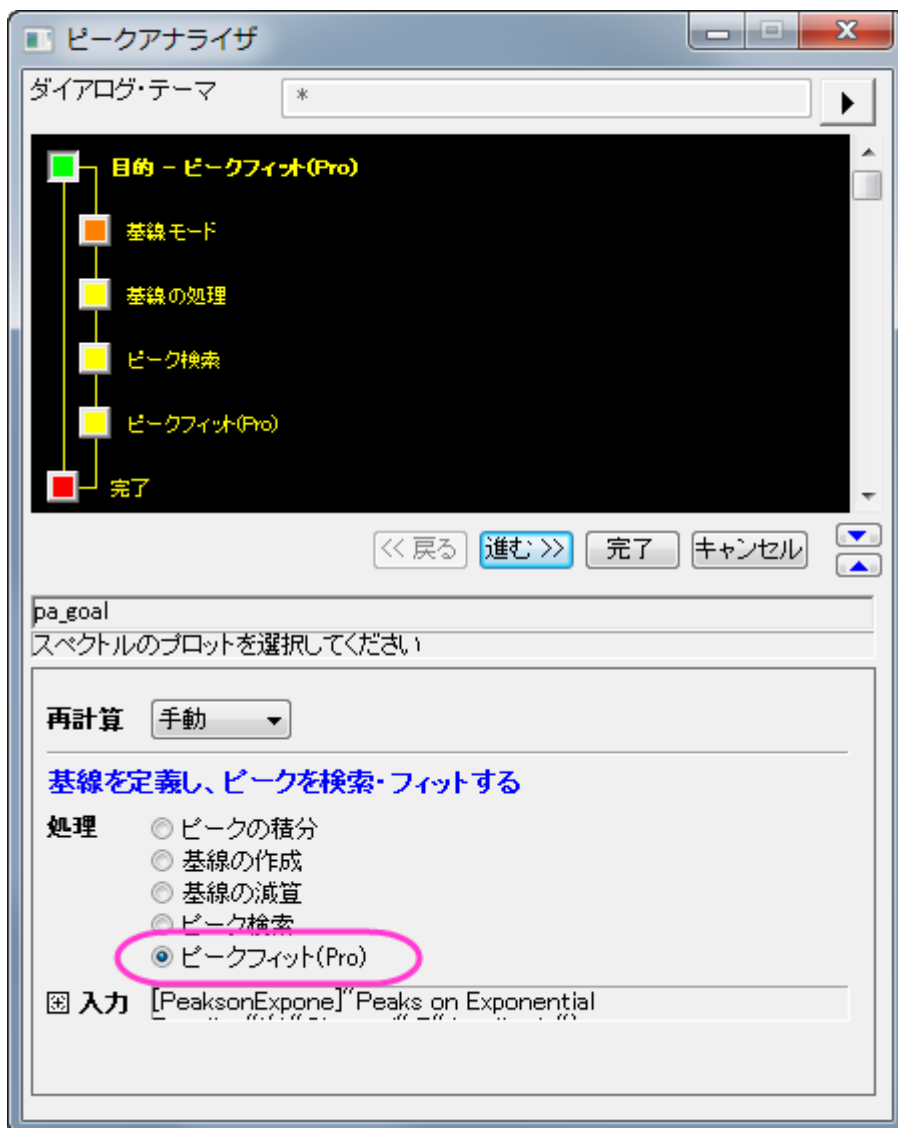
ステップ

1. 新しいワークブックを開き、Samples\Spectroscopy\Peaks on Exponential Baseline.dat ファイルをインポートします。
2. ワークシートの 2 列目を選択します。

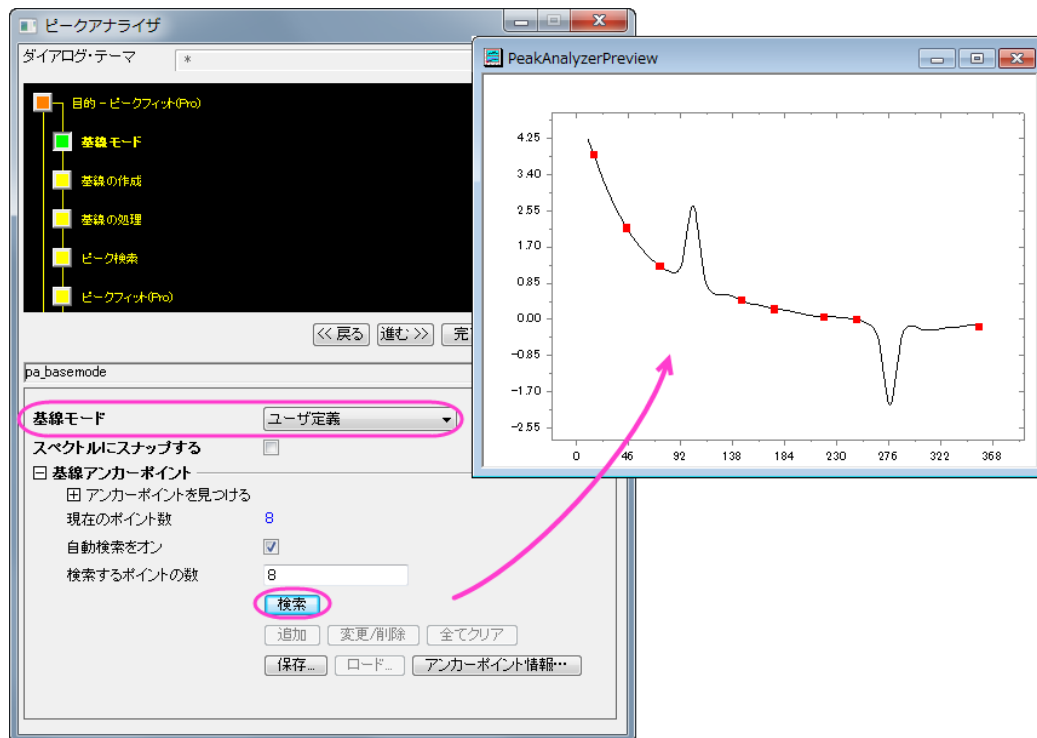


3. メニューから**解析:ピークと基線:ピークアナライザ**を選び、**ピークアナライザ**を開きます。

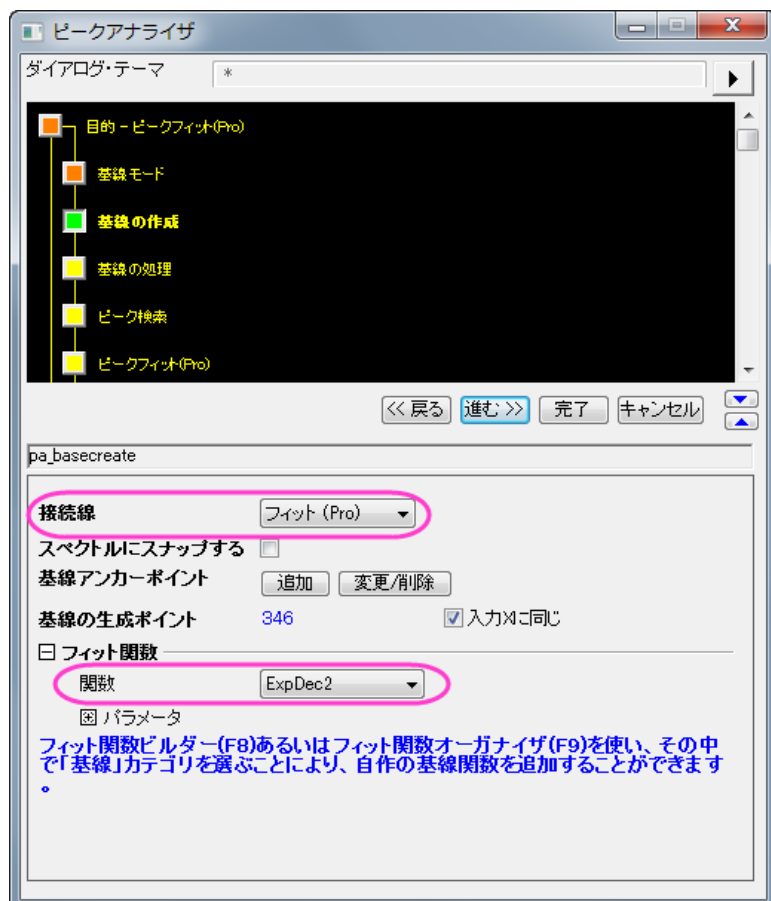
4. 最初のページの「ゴール」グループの「ピークのフィット」ラジオボタンを選択します。「進む」をクリックし、「基線モード」ページに移動します。



5. 基線モードページで、基線モードドロップダウンリストからユーザ定義を選びます。「基線アンカーポイント」グループで、「検索」ボタンをクリックします。8つのアンカーポイントが見つかります。次に、進むをクリックし、基線の作成ページに移動します。



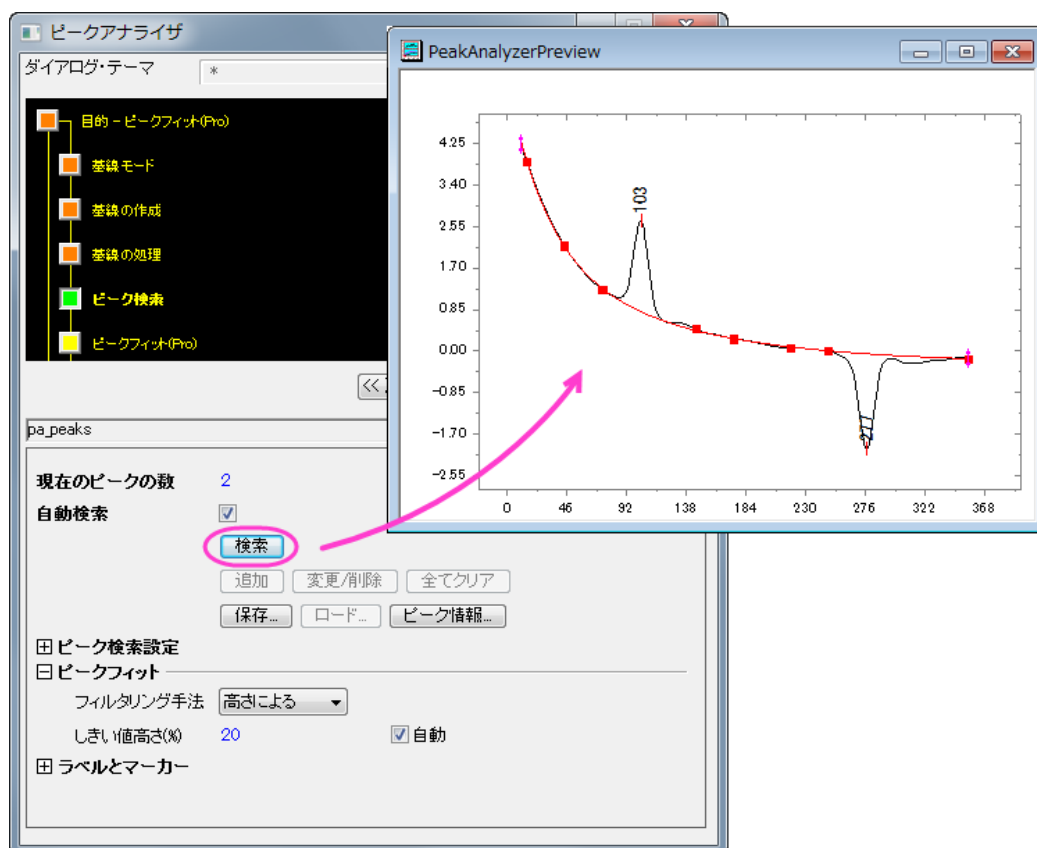
6. 基線の作成ページの接続線ドロップダウンリストで、関数でフィットを選びます。「フィット関数」グループで、「関数」ドロップダウンリストから「ExpDec2」を選びます。「進む」をクリックし、「基線の処理」ページに移動します。



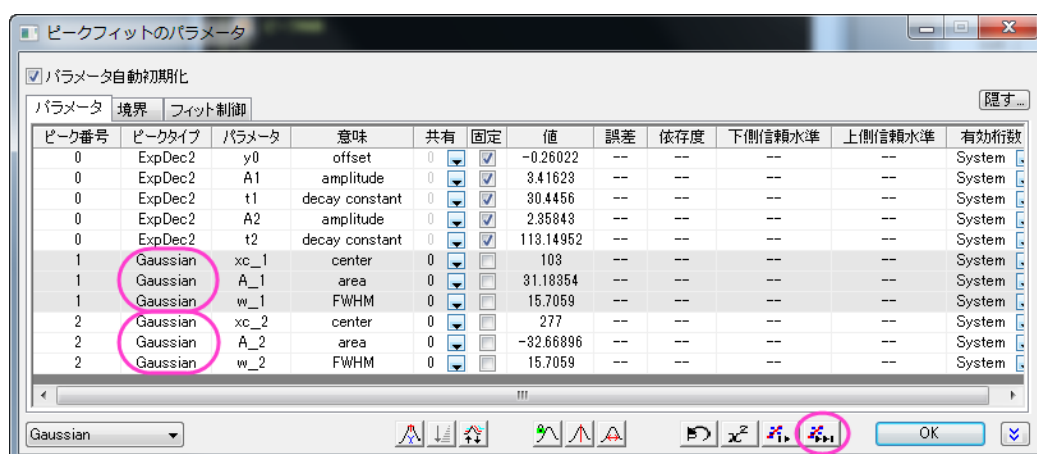
7. 基線の処理ページで、ピークを持つ基線のフィットチェックボックスを選択します。「進む」をクリックし、「ピーク検索」ページに移動します。



8. ピークの検索ページで検索ボタンをクリックすると2つのピークが見つかります。進むをクリックしてピークのフィットページに移動します。



9. ピークのフィットページでフィット制御ボタンをクリックして、ピークフィットのパラメータダイアログを開きます。
10. 「ピークフィットのパラメータ」ダイアログで、両方のピークタイプが Gaussian になっていることを確認します。「収束までフィット」ボタンをクリックします。フィットが済んだら、OK をクリックして、ダイアログを閉じます。



11. ピークのフィットページに戻り、完了ボタンをクリックして分析を完了します。元のワークブック内に結果シートが作成され、グラフレポートも作成されます。



事前セットされたピークパラメータを使ってピークフィットを行う

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ステップ](#)
 - [3.1 Sピーク位置とピークパラメータを含むテーマを保存する](#)
 - [3.2 テーマを再利用する](#)

サマリー

事前にセットしたピークパラメータでピークフィットを実行したい場合があります。例えば、ピークの数や中心位置が決まっているようなデータセットが数多くあるような場合です。関心があるのは、主にピークの他のパラメータ、例えば高さである場合などです。ピークアナライザのテーマの機能を使って、固定のピークパラメータで簡単にピークフィットを実行することができます。

必要な Origin のバージョン: Pro 2016 SR0

学習する項目

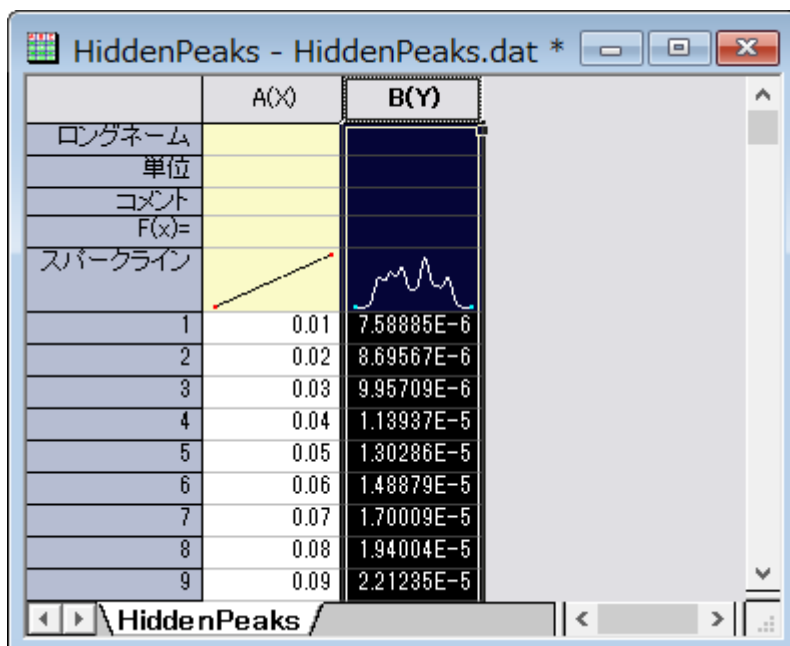
1. ピークアナライザの設定をテーマに保存し、再利用する方法
2. ピークパラメータを固定にする方法

ステップ

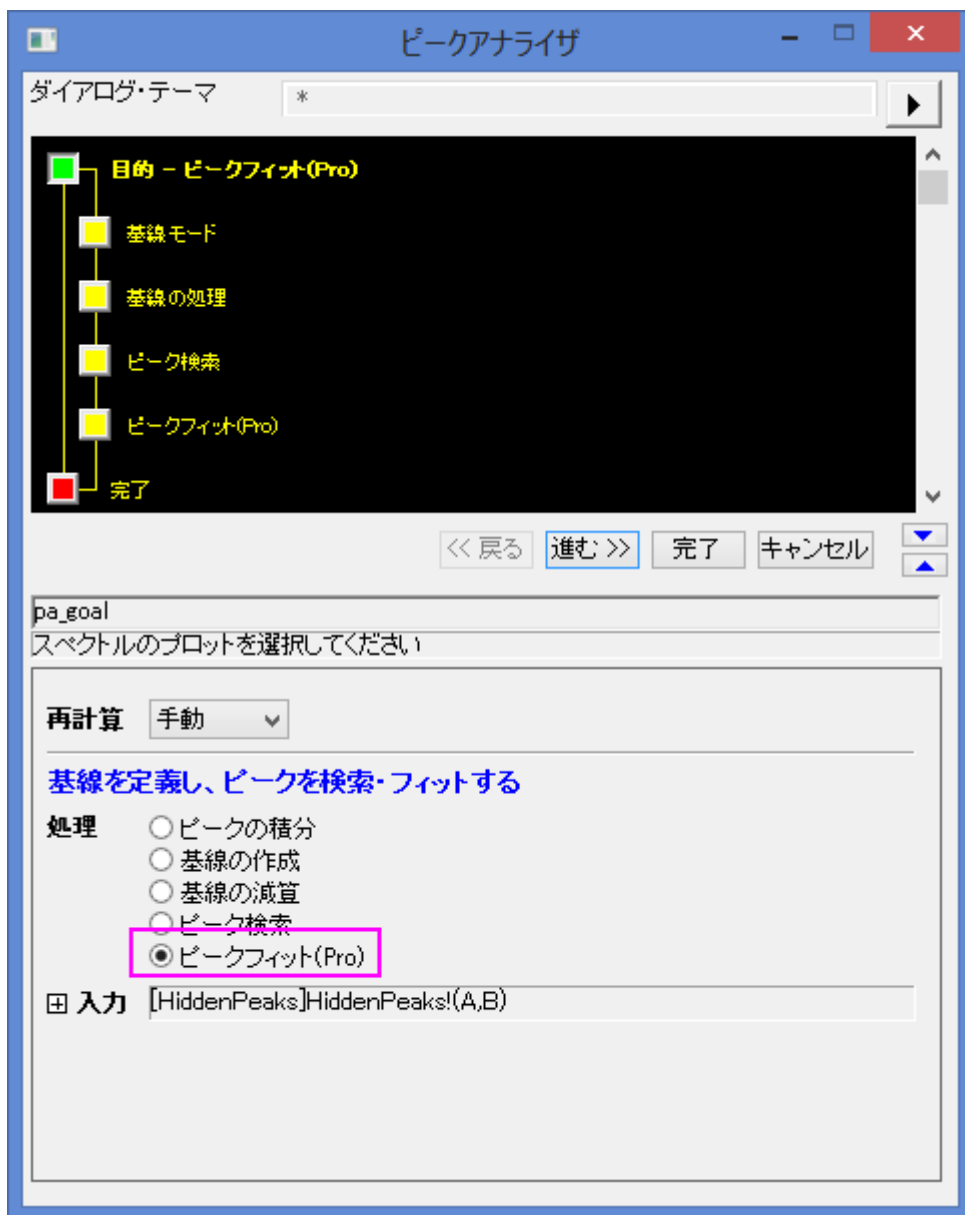
ピーク位置とピークパラメータを含むテーマを保存する

1. 新しいワークブックを開き、<Origin のインストールフォルダ>\Samples\Spectroscopy\HiddenPeaks.dat ファイルをインポートします。

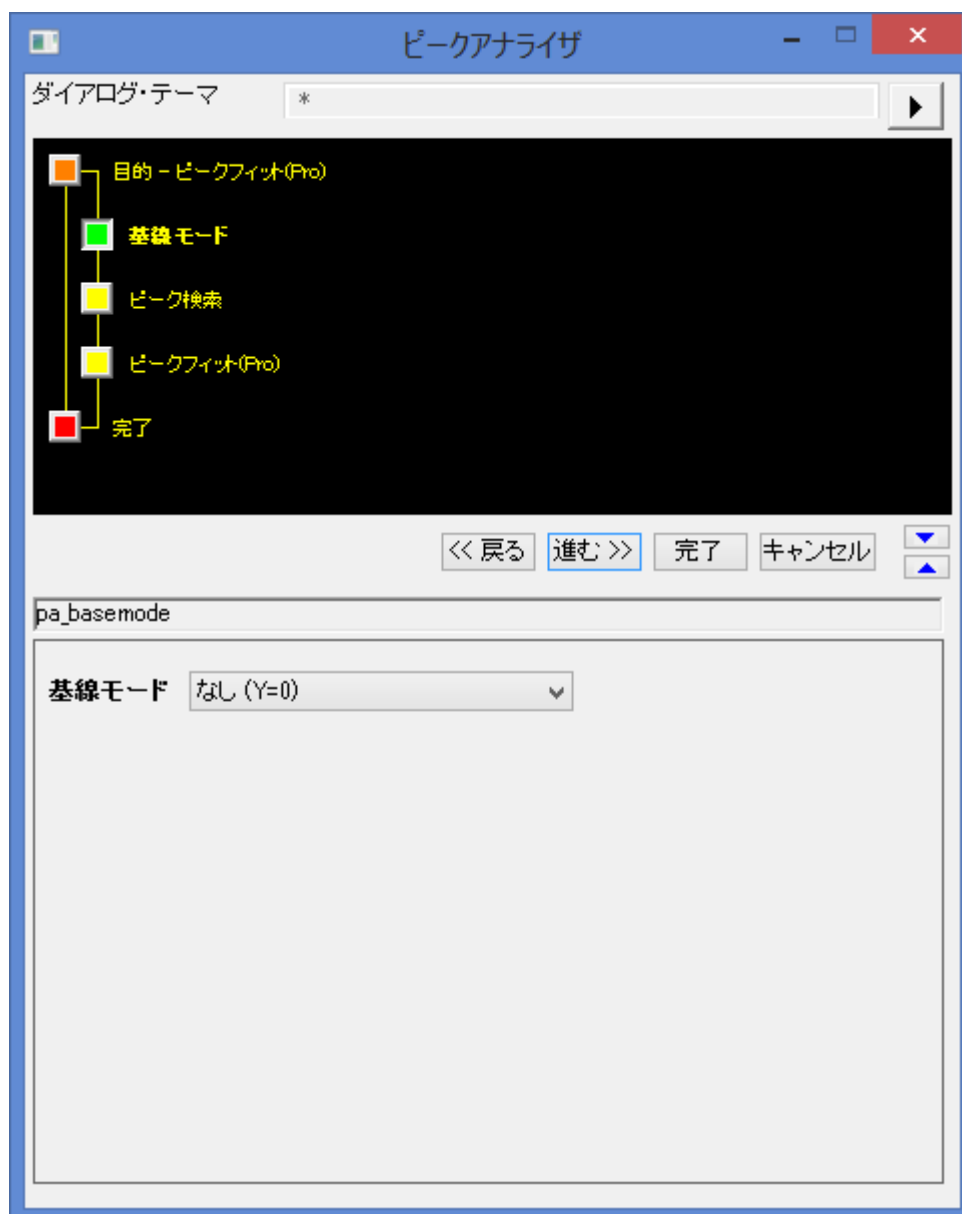
2. データ列を選択し、「統計:ピークと基線:ピークアナライザ」を選び、ピークアナライザを開きます。



3. 最初のページで、ゴールグループのピークのフィットを選びます。「進む」をクリックし、「基線モード」ページに移動します。

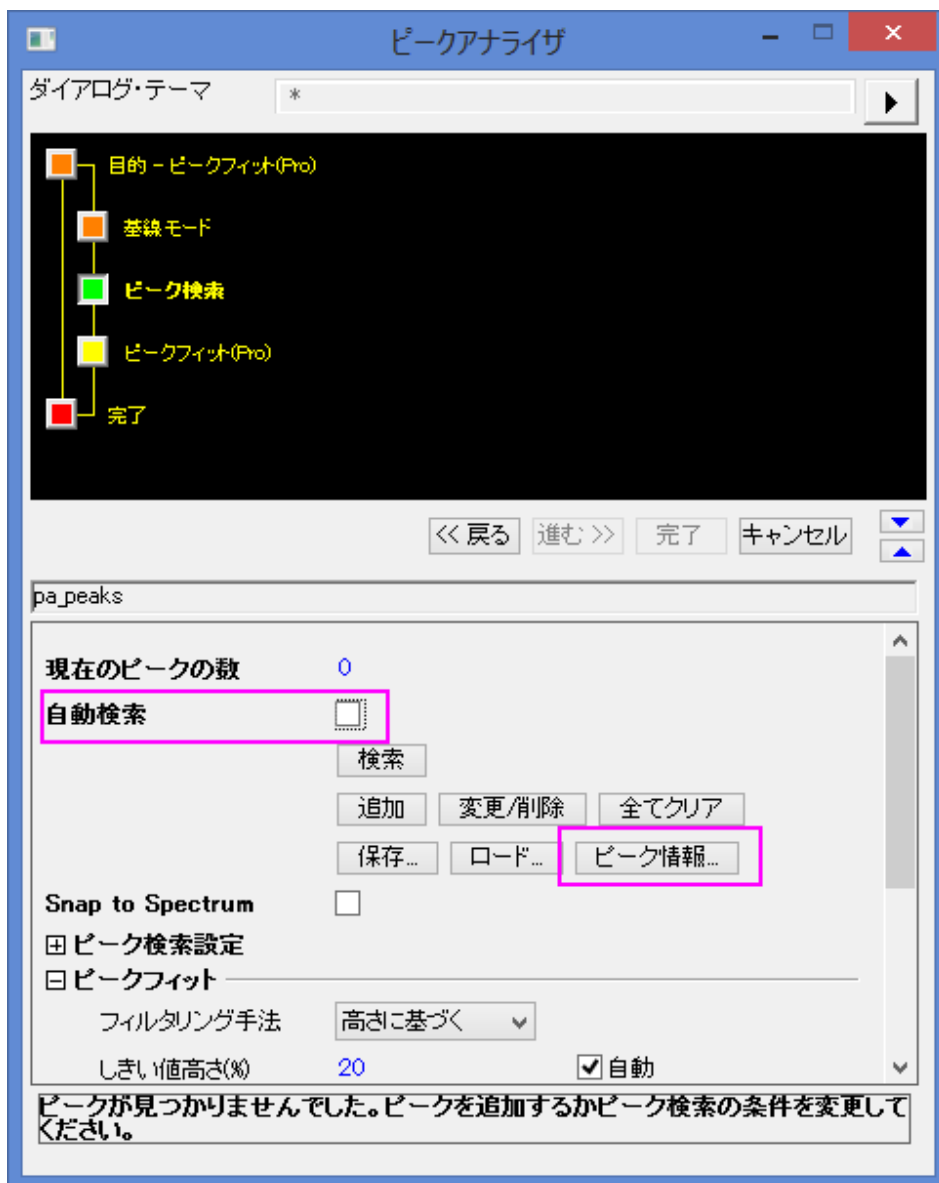


4. 「**基線モード**」ページで、**基線モード**ドロップダウンリストから**なし**を選びます。「**進む**」をクリックし、「**ピーク検索**」ページに移動します。

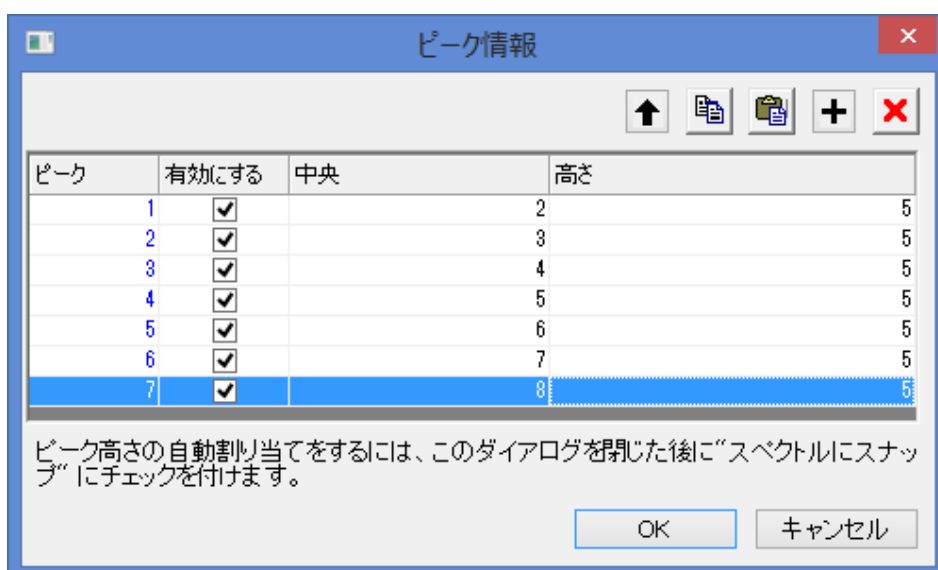


5. 「ピーク検索」ページで

- a. ピークを手動で検索するので「自動検索」のチェックを外します。ピーク情報ボタンをクリックして、ピーク情報ダイアログを開きます。



- b. ピーク情報ダイアログで、追加ボタンを7回クリックして、7つのピークを追加します。ピークの中心と高さを次のように入力します。

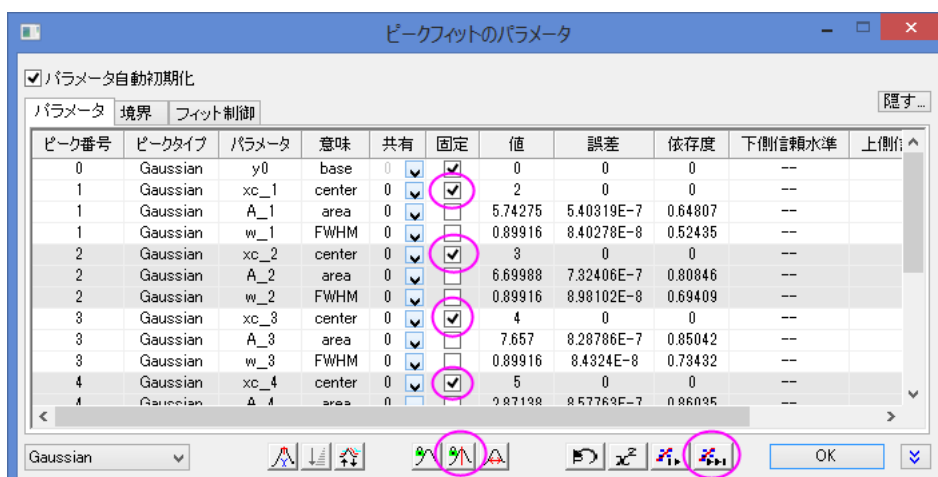


OK をクリックして、ピークアナライザに戻ります。

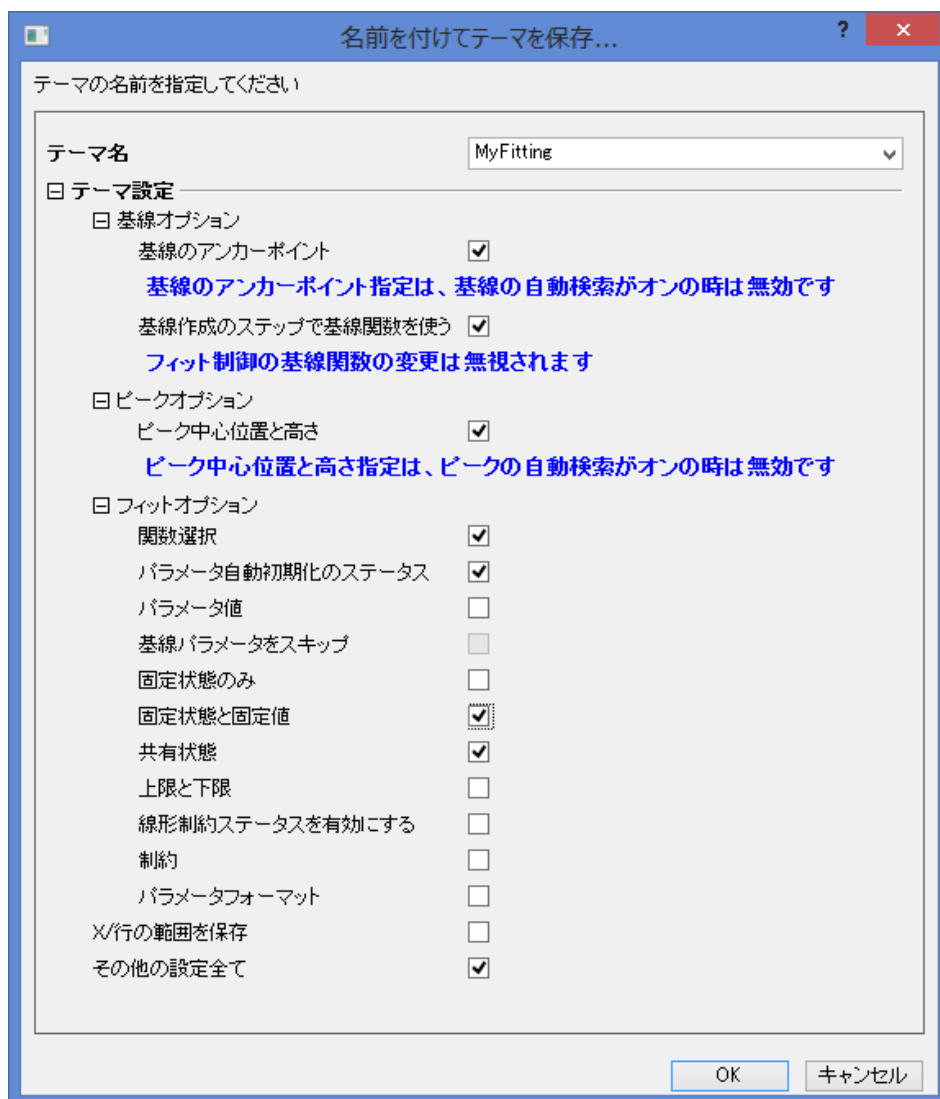
- c. 進むをクリックし、ピークのフィットページに移動します。

6. 「ピークのフィット」ページで

- a. 「フィット制御」ボタンをクリックして、「ピークフィットパラメータ」ダイアログを開きます。
- b. 「ピークフィットパラメータ」ダイアログで、すべての「全ピーク中心の解除または固定」ボタンをクリックします。そして収束までフィットボタンをクリックします。フィットが済んだら、OK をクリックして、ピークアナライザに戻ります。



- c. 上側パネルでダイアログテーマのコントロールの右にある右向き三角のボタンをクリックします。ショートカットメニューから「名前を付けて保存」を選択します。名前を付けてテーマを保存ダイアログが開きます。
- d. 「名前を付けてテーマを保存」ダイアログで、テーマ名に MyFitting と入力します。下図のようにチェックボックスのチェックを付けたり、外したりします。



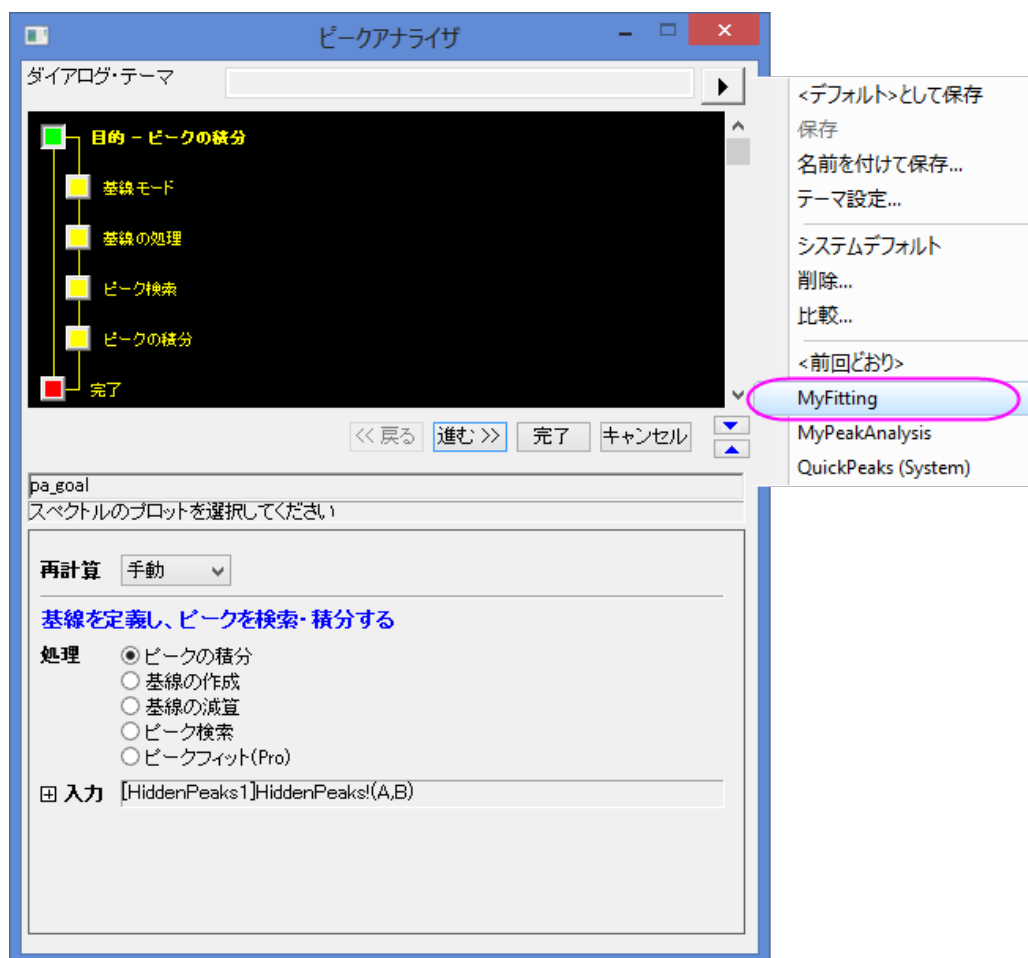
OK をクリックしてテンプレートを保存します。すると、ピークアナライザダイアログに戻ります。

- e. ピークアナライザにある「完了」ボタンをクリックして、分析を終了します。

テーマを再利用する

- 別の新しいワークブックを開き、<Origin のインストールフォルダ>\Samples\Spectroscopy\HiddenPeaks.dat ファイルをインポートします。
- 2 列目を選択します。
- メインメニューから解析:ピークと基線:ピークアナライザを選び、ピークアナライザを開きます。

4. ピークアナライザの最初のページで、ダイアログテーマの右にある右向き三角のボタンをクリックします。ショートカットメニューから、MyFitting を選択します。



5. 進むをクリックして、各ステップの設定が正しいかどうかをチェックします。「ピークの検索」ページで、ピークの中心と高さが前回と同じであることが確認できます。
6. 最後のページまで進んだら、「フィット制御」ボタンをクリックして、「ピークフィットパラメータ」ダイアログを開きます。すべてのピークの中心は固定で、値が前回と同じになっていることを確認します。OK をクリックして、ピークアナライザに戻ります。
7. 「完了」ボタンをクリックして分析を完了します。結果を確認して、前回行った結果と同じになっているかを調べます。



複数ピークのパラメータの固定、共有の状態や境界を同時に設定する

サマリー

ピーク分析を行う際、複数ピークのパラメータの固定、共有の状態や境界を同時に設定することが多々あります。ピークの数
が2,3個の場合、1つ1つのピークパラメータの設定を行えば良いでしょう。しかし、多くのピークがある場合、この方法では

大変時間がかかります。より効率よくこの手順を進める為、**ピークアナライザ**はでは、複数ピークのパラメータの固定、共有の状態や境界を同時に設定することができるコンテキストメニューを提供しています。これらの設定の詳細については、Origin ヘルプファイルを参照してください。

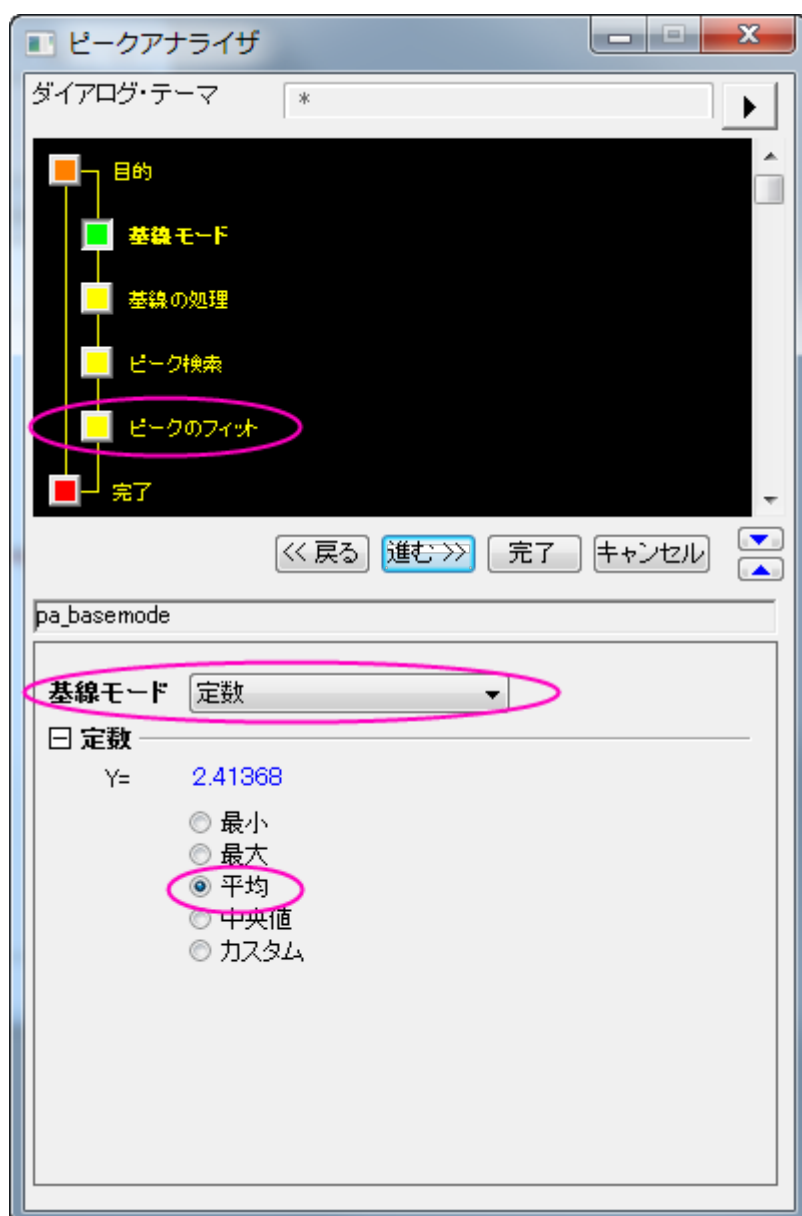
必要な Origin のバージョン:Pro 8.0 SR6

学習する項目

- 複数ピークのパラメータの共有の状態を同時に設定する
- 複数ピークのパラメータの上側境界と下側境界を同時に設定する

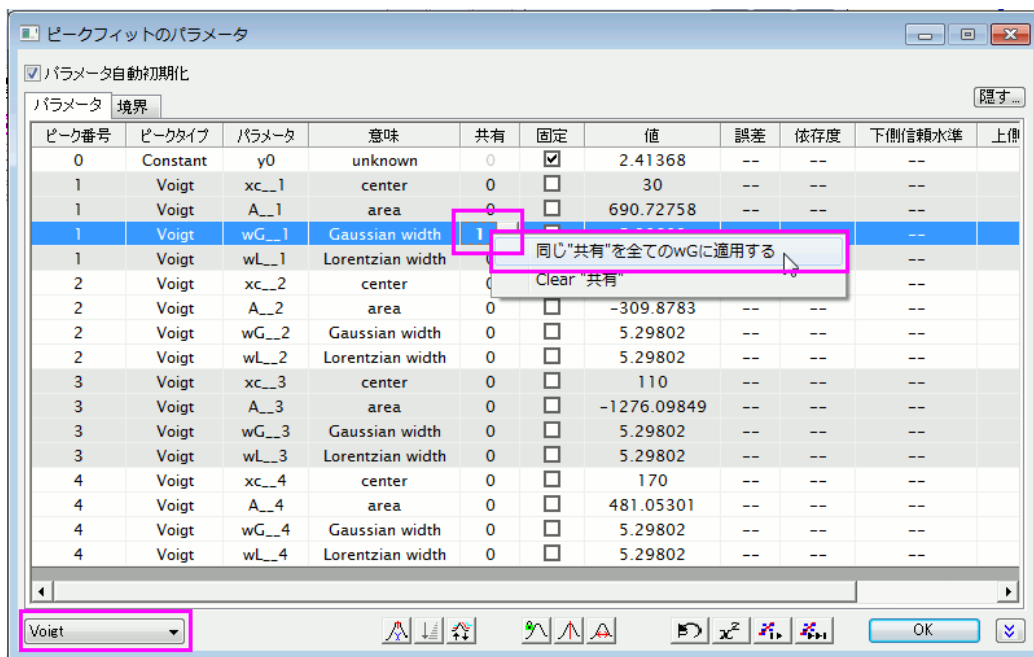
ステップ

1. 新しいワークブックを開き、<Origin Program Folder>\Samples\Spectroscopy\Positive & Negative Peaks.dat ファイルをインポートします。
2. 2 列目を選択し、メニューから**解析:ピークと基線:ピークアナライザ**を選び、**ピークアナライザ**ダイアログを開きます。最初のページ(目的ページ)で、**処理の中からピークフィット(Pro)**ラジオボタンを選択します。それから、**進む**ボタンをクリックして、次のページに移動します。
3. **基線モード**ページで、**基線モード**ドロップダウンリストから**定数**を選択し、**定数グループ**では**平均**を選びます。そして、ウィザードマップの**ピークのフィット**をクリックして、**直接ピークのフィット**ページに移動します。

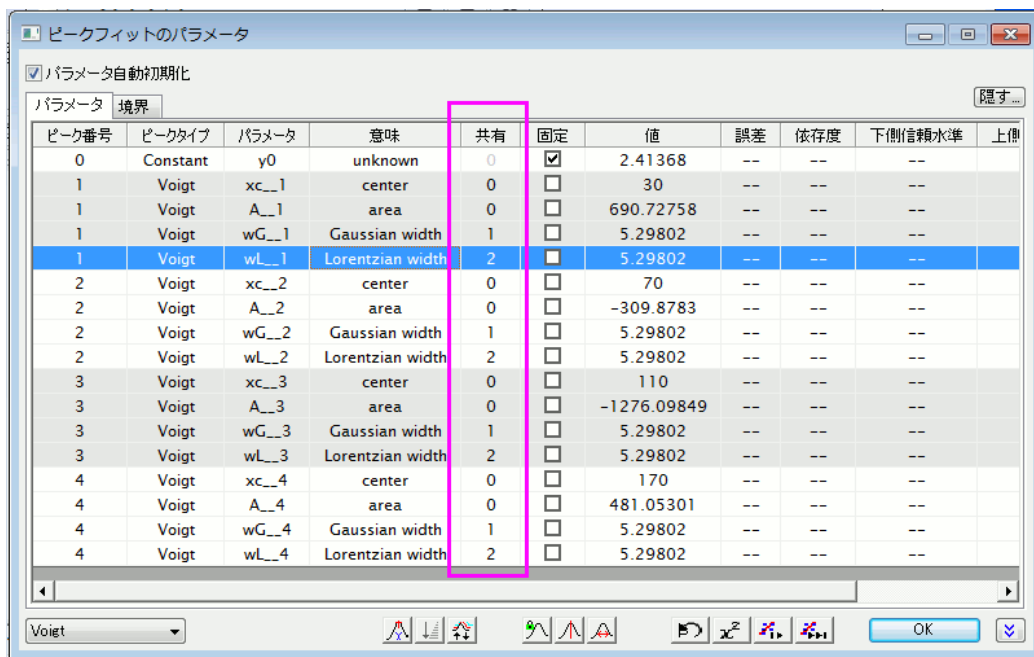


4. 「ピークのフィット」ページで

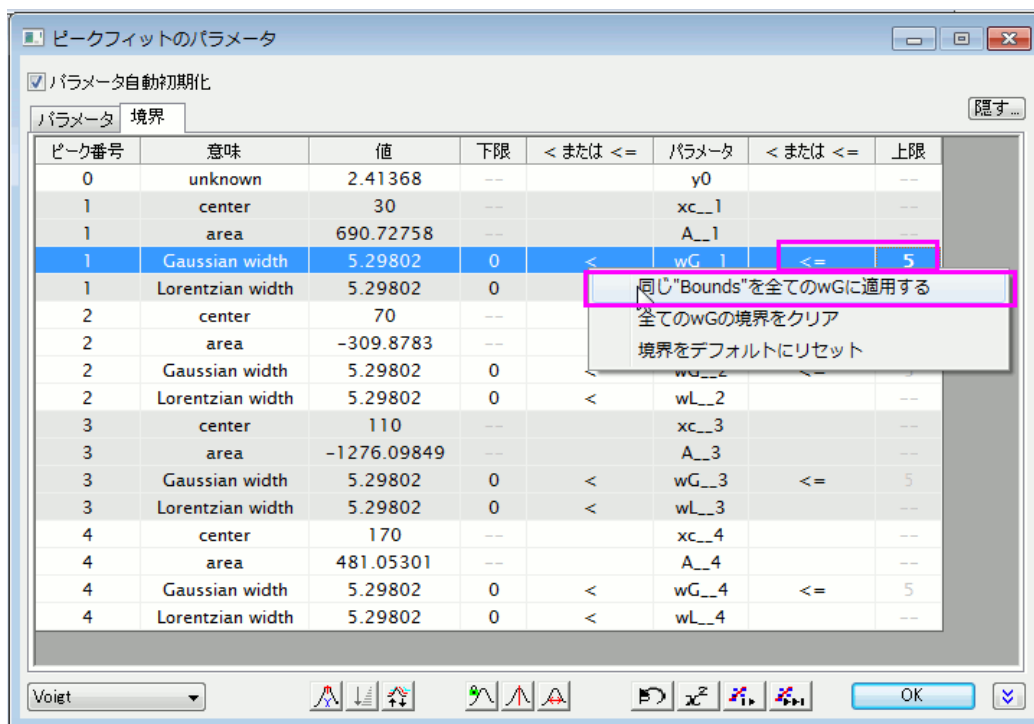
1. ダイアログ下にあるフィット制御ボタンをクリックして、ピークフィットパラメータダイアログを開きます。ダイアログの上側パネルの左下のドロップダウンリストで、フィット関数として **Voigt** を選びます。
2. パラメータタブをアクティブにし、**wG_1** 行の共有列から **1** を選びます。その上で右クリックし、**同じ"共有"をすべての wG に適用する** を選択します。すると、**wG** を持つすべてのパラメータが同じグループ内で共有されることになります。



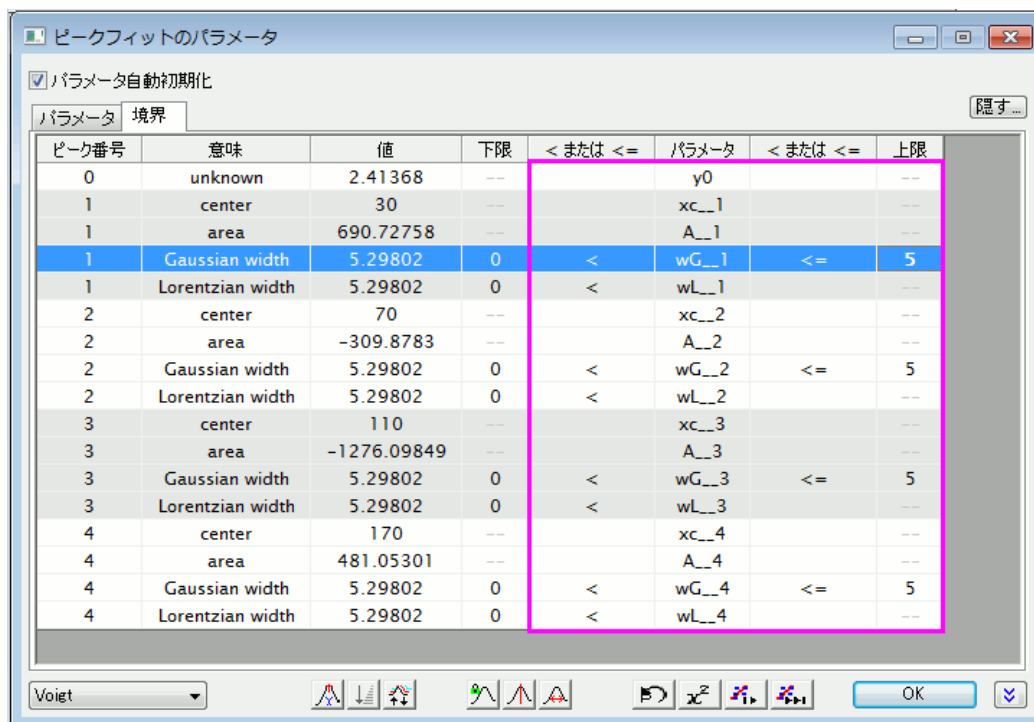
3. そして、wL_1 行の共有列から 2 を選びます。その上で再び右クリックし、同じ"共有"をすべての wL に適用するを選択します。すると、wL を持つすべてのパラメータが同じグループ内で共有されることとなります。ここまでの操作で、パラメータタブは下図のようになります。



4. 境界タブをクリックします。最初の Gaussian width 行の 2 番目の < または <= 列のセルをダブルクリックします。すると、このセルに <= が表示されます(もう一度セルをダブルクリックすると < が表示されます)。同じ行の上限に 5 と入力します。
5. そして、それを右クリックして、同じ"境界"をすべての wG に適用するを選びます。



すると、境界タブは次のようになります。



5. 収束までフィットボタンをクリックします。フィットが済んだら、OK をクリックして、ダイアログを閉じます。
6. 「ピークのフィット」ページに戻り、「完了」ボタンをクリックして分析を完了します。元のワークブック内に結果シートが作成され、グラフレポートも作成されます。

4.5. データ操作

列値の設定

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 列値の設定](#)
 - [2.1 等差級数で列値を入力する](#)
 - [2.1.1 オートフィルを使用する](#)
 - [2.1.2 数字のセットで埋めるを使用する](#)
 - [2.2 他の列を使用する](#)
 - [2.3 組み込み関数を使用する](#)
 - [2.4 他のシートの列を使用する](#)
 - [2.5 セル値を使用する](#)
 - [2.6 ワークブックのメタデータの変数を使用する](#)
- [3 セル値の設定](#)

サマリー

Origin には、ワークシートの列に値を入力する方法がいくつか用意されています。**オートフィル**またはスクリプトコマンドを使用して、一連の値を入力します。**F(x)** 行、または「**値の設定**」ダイアログを使って、データセットを作成したり、データセット間の演算を実行する計算式を定義します。同じシートまたは他のシートやブックから他の列の値を参照します。値を計算する組込関数の大きな選択肢の中から選びます。ワークシートまたは列見出しに格納されているメタデータから変数を作成し、これらの変数を列式に使用します。

このチュートリアルは、以下のようなグラフを作成する方法を示しています。

- 等差級数で列値を入力する
- 組み込み関数を使用する
- 他の列を使用する
- セル値を使用する
- ワークブックのメタデータの変数を使用する



Origin はバージョン 2018 SR0 から、数式を使用してセル値を設定することをサポートしています。

このチュートリアルでは、

- ワークシートのセルに式を入力してセルの値を計算する方法をご案内します。
- セル値の自動設定

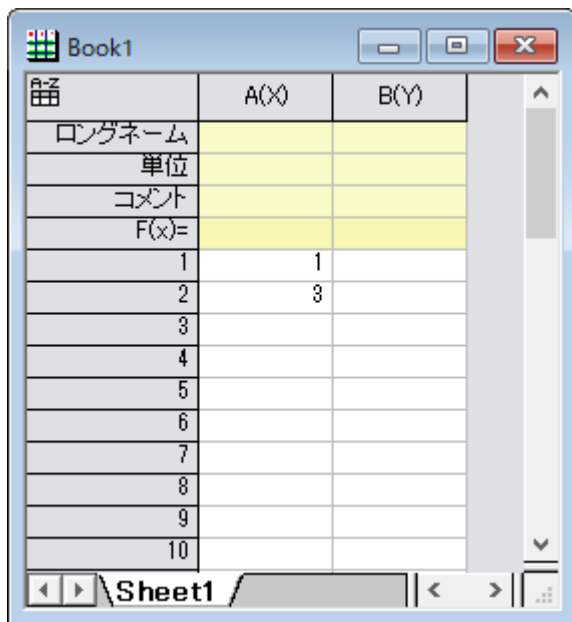
列値の設定

等差級数で列値を入力する

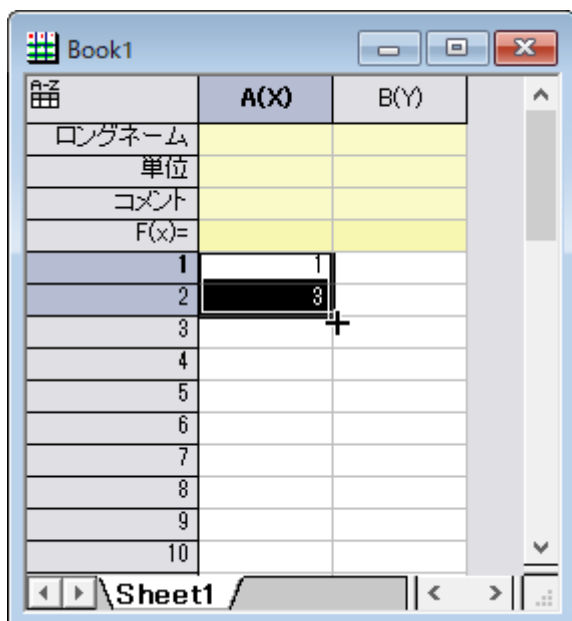
Origin には、列を算術級数で満たす複数の方法が用意されています。

オートフィルを使用する

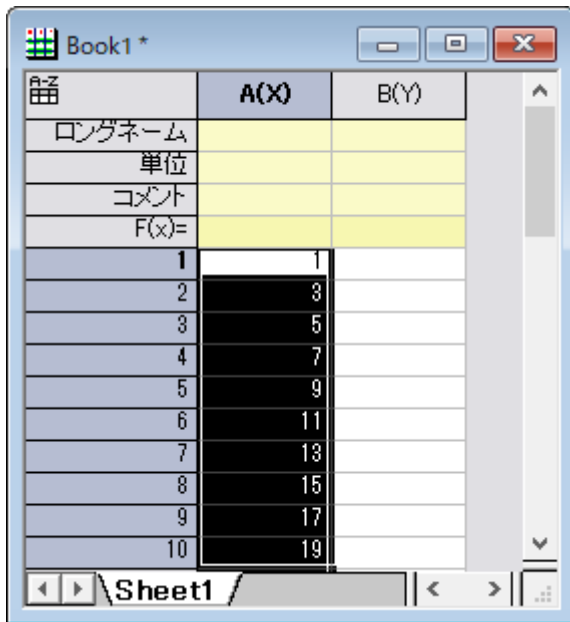
1. セルにいくつかの開始値を入力します。



2. 2つのセルを選択します。
3. マウスを2番目のセルの右下隅に移動します。マウスカーソルの形状が"+"に変わります。



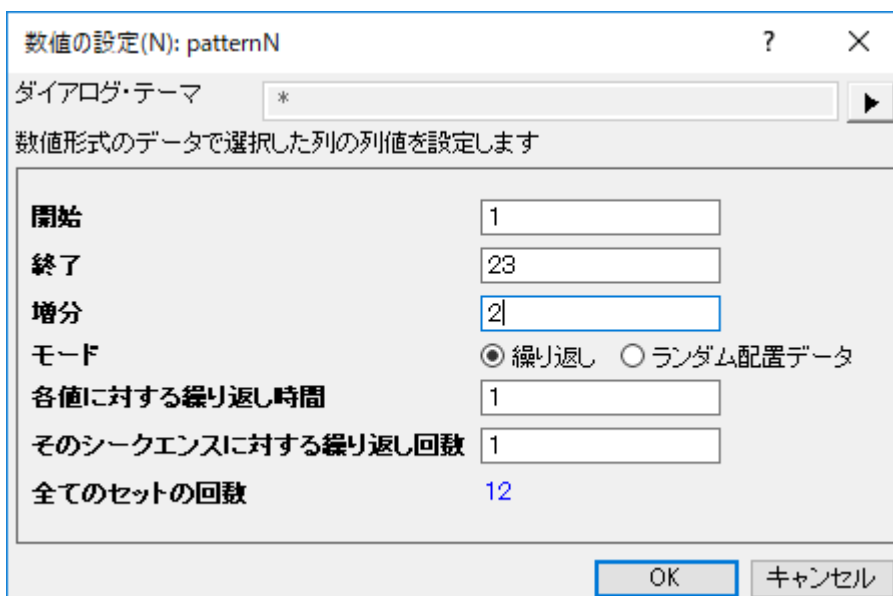
4. マウスを列の下にドラッグします。列に 1, 3, 5, 7 のように入力されます。..



右側にドラッグすることで行を自動入力することもできます。さらに、セル値のシーケンスを他の列または行のセルにコピーするには、Shift キーを押しながら目的のシーケンスを選択し、Ctrl キーを押しながらドラッグします。

数字のセットで埋めるを使用する

1. 列 B を選択して、列メニューの列値の一律設定: 数字のセットを選択し、数値の設定 ダイアログを開きます
2. 終了を 23 にします。増分を 2 にします。



3. OK ボタンをクリックすると、列 B に 1, 3, 5, ..., 23 のように入力されます。

他の列を使用する


ここでは、どのように **F(x)** 行に式を入力し、列の値を設定するかをご説明します。


1. 新しいワークブックを作成します。 **Samples\Data Manipulation**\ フォルダから US Metropolitan Area Population.dat ファイルをインポートします。
2. ワークシートに新しい列を追加します(ワークシートの最後の列の右側で右クリックし、コンテキストメニューから**新しい列の追加**を選びます。)。列のロングネームを"Population/Sq.Mi."に *Mi.*を選びます。
3. 人口密度を計算には、**B/A** を E 列の F(x) 行に入力します。

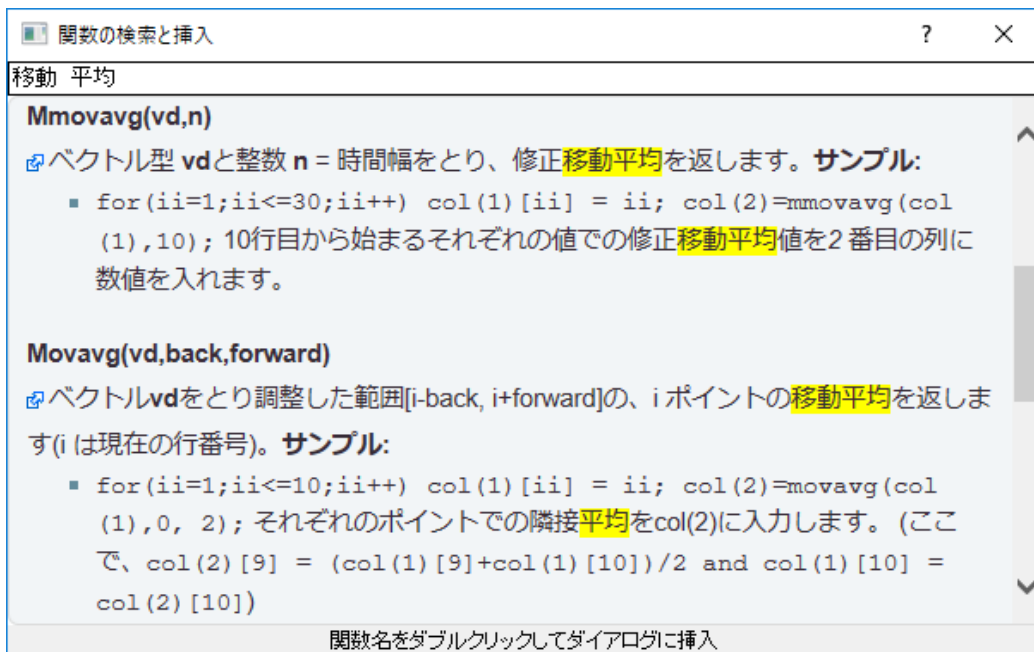
名前	A(X)	B(Y)	C(Y)	D(Y)	E(Y)
ロングネーム	Population	Sq. Mi.	Density	Metropolitan Area	Population/Sq.Mi.
単位					
コメント					
F(x)=					A/B
スパークライン	[Sparkline chart showing three data points]				
1	119655	915.7	130.7	Abilene, TX	130.67053
2	112561	685.5	164.2	Albany, GA	164.20277
3	874304	3248.5	269.1	#####	269.14083

4. 他の 2 列からのデータを使って、列が計算されます。

組み込み関数を使用する

1. 新しいワークブックを作成します。 **Samples\Signal Processing**\フォルダから *Step Signal with Random Noise.dat* をインポートし、B 列の移動平均、B 列のポイントのある前後サンプルから平均を計算します。
2. 標準ツールバーにある**列の追加**ボタン  をクリックして新しい列 C を追加します。この列を選択して右クリックし、**列値の設定**をクリックして、**値の設定**ダイアログを開きます。

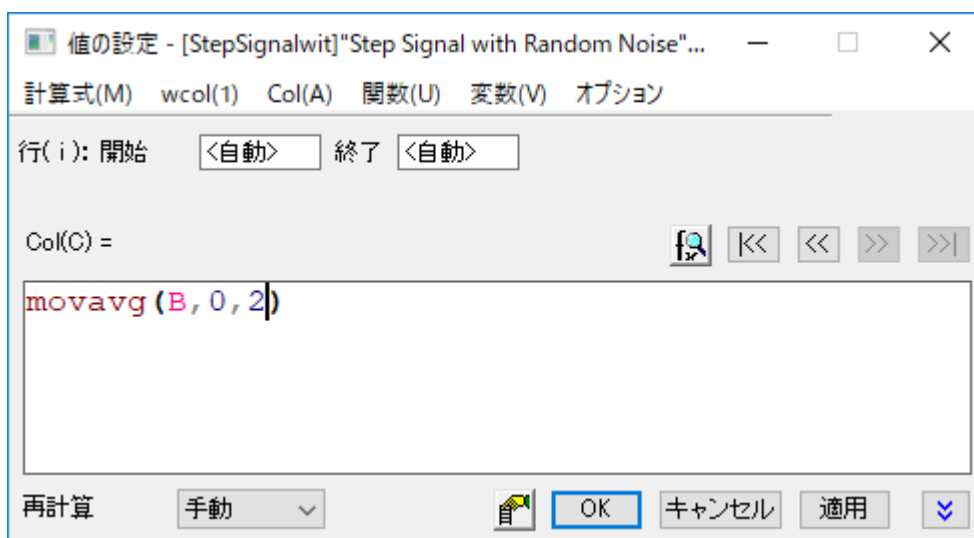
3. 値の設定ダイアログで関数の検索と挿入ボタン  をクリックしてキーワード「移動平均」を検索します。



4. 関数名である **Movavg(vd,back,forward)** をダブルクリックして値の設定ダイアログに挿入し、開いている「関数の検索と挿入」ダイアログを閉じます。



5. **vd** をハイライトして選択します。vd の文字を選択して、vd を **B** に変更し、**back** を **0**、**forward** を **2** に変更します。数式は次のようになります：



6. **OK** をクリックします。最後の列に列 B の移動平均の値が出力されます。

説明	A(X)	B(Y)	C(Y)
ロングネーム	time	signal with noise	
単位			
コメント			
F(x)=			movavg(B,0,2)
スパークライン			
1	1	-0.08277	-0.00402
2	2	0.02274	-0.0171
3	3	0.04798	0.00562
4	4	-0.12202	-0.01639
5	5	0.09091	-0.04684
6	6	-0.01806	-0.10784
7	7	-0.21336	-0.04822
8	8	-0.09209	0.02915
9	9	0.1608	0.0521
10	10	0.01875	-0.01983



同じワークシート内の別の列を参照する場合は、インデックス (例: col(1))、ショートネーム (A または col (A) など)、またはロングネーム (例: "signal with noise" など) を使用して列を識別します。

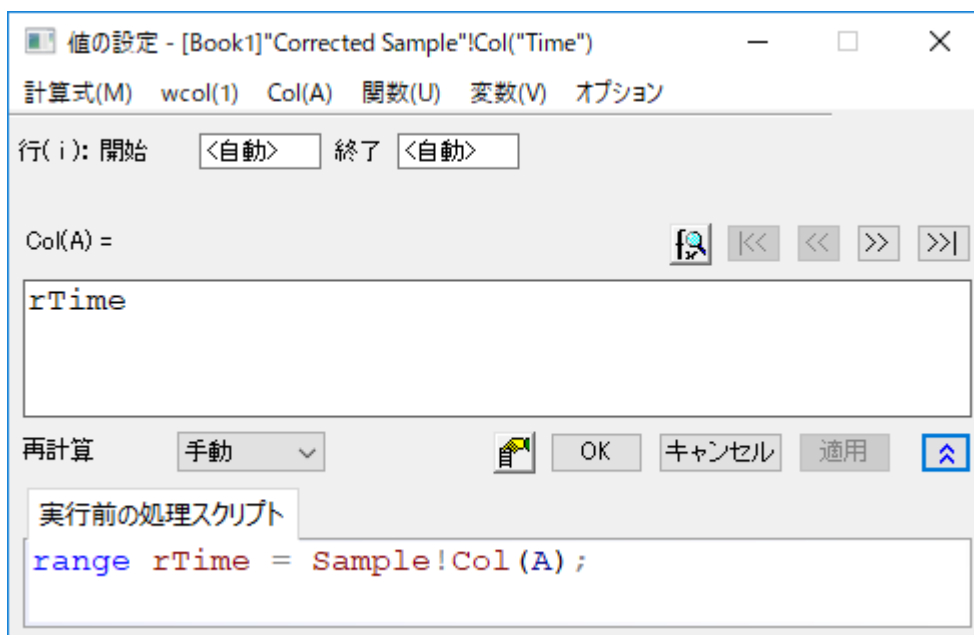
他のシートの列を使用する

列値の設定ダイアログボックスには、他のブックシートを指定するための範囲変数を簡単に挿入できる挿入メニューがあり、他のブックシートを現在の列の値の計算に使用することができます。

1. プロジェクトファイル **Samples\Data Manipulation\Setting Column Values.OPJ** を開き、**Columns from Other Sheets** サブフォルダを開きます。
2. シート **Sample** を右クリックし、「**データなしで複製**」を選択します。(現在の名前をダブルクリックすることで)複製したシートの名前を **Corrected Sample** のように変更します。
3. これらの3つの列には、他のシートの列を参照する数式に基づくデータを入力します。最初の列を選択して右クリックし、**列値の設定**を選んでダイアログを開きます。**変数:選択から範囲変数を追加**を選択し、**ワークシートから選択する**ダイアログを開きます。ワークシート内のある範囲を直接選択すれば、**実行前の処理スクリプト**パネルで範囲変数として定義し、使用することができます。
4. **ワークシートから選択する**ダイアログが開き、**Sample** シートがアクティブにして、A列を選択し **完了** ボタンをクリックします。**入力モード**ダイアログが開くので **OK** をクリックして戻ります。
5. 「range r1 = Sample!Col(A);」が自動的に**実行前の処理スクリプト**に挿入されます。次のように式を編集します。

```
range rTime = Sample!Col(A);
```

6. そして、**列の計算式**に **rTime** と入力し、**OK** ボタンをクリックすると、1列目のデータを作成します。



7. **Corrected Sample** ワークシートで、列 B と列 C を強調表示し、右クリックします。ショートカットメニューから、**複数列の値を設定**を選択してダイアログを開きます。そして**変数:選択から範囲変数を追加**を選択し、2つの変数(**Sample** シートと **Reference** シートの B 列)を**実行前の処理スクリプト**に挿入します。これらの新しいエントリを次のように編集します:

```
range rSample = Sample!Col(B);
```


8. および、

```
range rRef = Reference!Col(B);
```

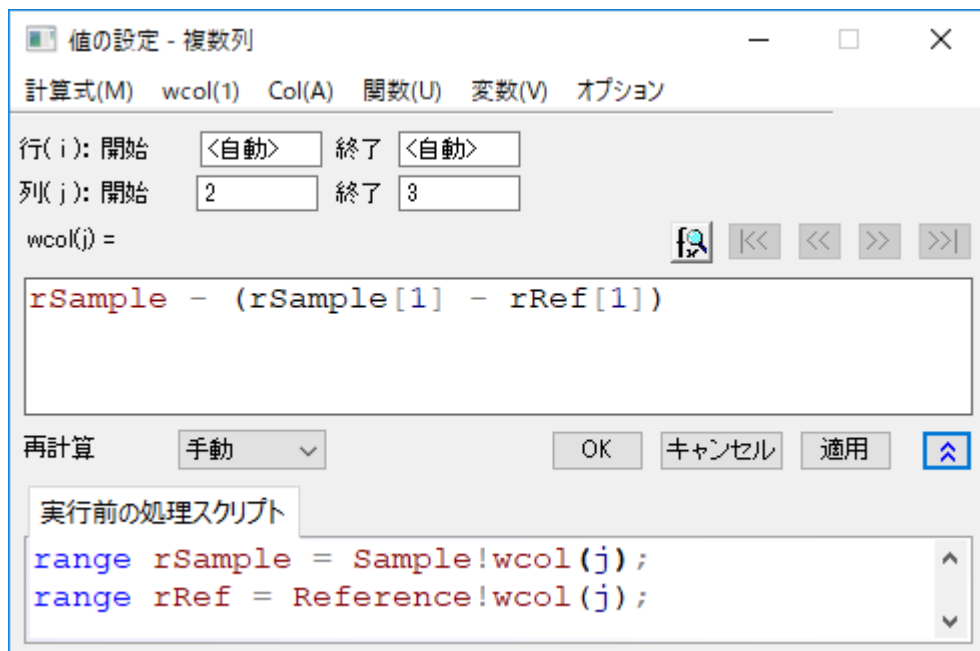
9. では、**実行前の処理スクリプト**にある範囲変数(range)を編集し、別の計算式で同じ結果が得られるようにしてみましょう。2つの範囲変数にある列名 **Col(B)**を消去し、両方の行で、**変数: 事前定義変数: wcol(_ThisNumCol)** を選択し、次のようにします。

```
range rSample = Sample!wcol(_ThisColNum);
```

```
range rRef = Reference!wcol(_ThisColNum);
```

11. そして、**列の計算式**ボックスに次の式を入力します。

```
rSample - (rSample[1] - rRef[1])
```



12. **OK** ボタンをクリックし、**Corrected Sample** ワークシートの B 列と C 列のデータを生成します。

	A(X)	B(Y)	C(Y)
ロングネーム	Time	Transducer 1	Transducer 2
単位	sec	mV	mV
スパークライ			
F(x)=	rTime	rSample - (rSample[1] - rRef[1])	
1	0	20.41	8.23
2	1	19.99	8.17
3	2	20.54	8.17
4	3	20.84	8.21
5	4	20.47	8.16
6	5	21.13	8.16
7	6	20.41	8.05
8	7	20.25	8.11
9	8	20.02	7.96
10	9	20.15	7.95



1. 角括弧を使って特定のセルを参照できます。上記の計算式にある[1]は、最初のセルということです。
2. 値の設定ダイアログのメニューで**計算式:保存**と**計算式:ロード**を選択すると、式を保存して他の列に新しいデータを生成する際にリロードして使用できます。

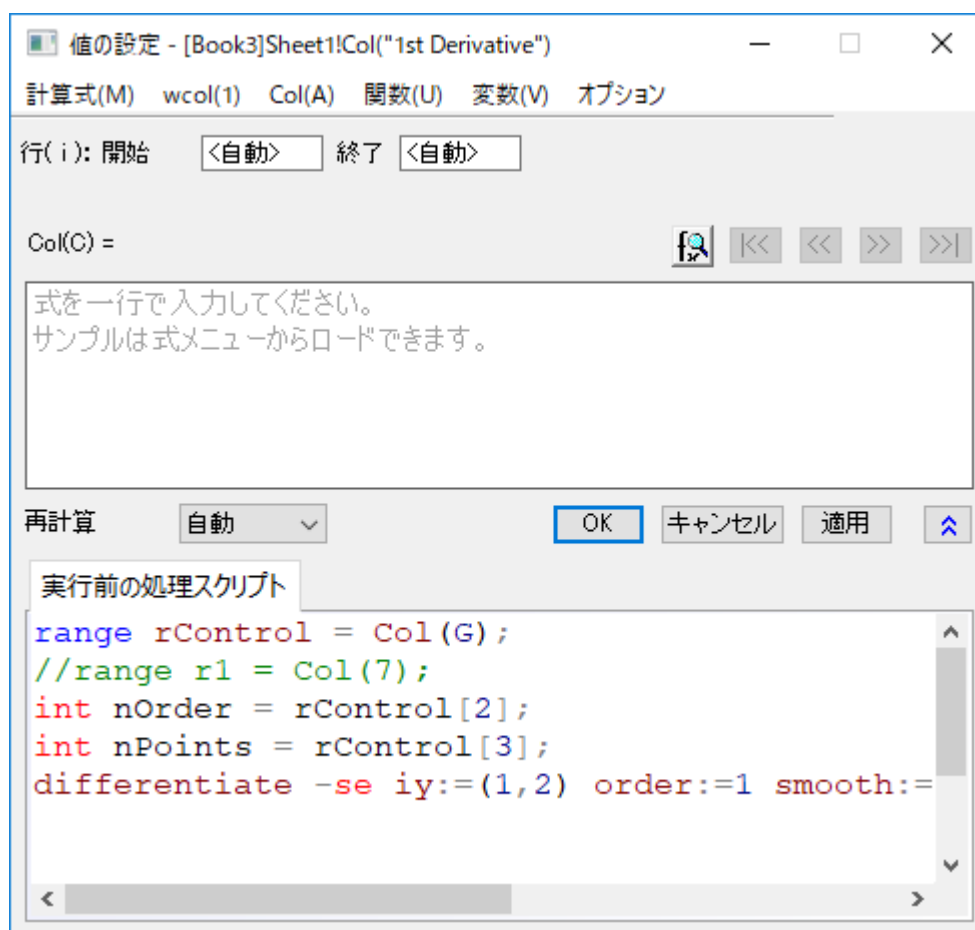
セル値を使用する

特定のワークシート・セルに含まれている値を参照し、列値を設定するための計算式の計算に使用できます。これにより、列内の値を更新するための制御セルとしてワークシート・セルを使用する簡単な方法が提供されます。

1. プロジェクトファイル **Samples\Data Manipulation\Setting Column Values.OPJ** を開き、**Cells in a Worksheet** サブフォルダを開きます。
2. C 列を右クリックし、**列値の設定 ...**コンテキストメニューを選択して列値の設定ダイアログを表示します。
3. **変数:選択**から**範囲変数を追加**メニューを使って、ワークシートから**選択**ダイアログを開きます。列 G(Value)をこのワークシートから選択して **完了** をクリックします。
表示される**入力モード**ダイアログで **OK** をクリックすると、**実行前処理スクリプト**に自動的に表示されます。
4. **実行前の処理スクリプト**パネルで、範囲変数(range)の名前を **rControl** に変更し、いくつか行を追加して、次のようなスクリプトにします。

```
range rControl = Col(G); //range r1 = Col(7); int nOrder = rControl[2];
int nPoints = rControl[3]; differentiate -se iy:=(1,2) order:=1 smooth:=1
poly:=nOrder npts:=nPoints oy:=(1,3);
```

5. スクリプトは、X ファンクション **differentiate** を呼び、多項式の次数およびポイント数に対する引数として、列 G のセル値を渡します。これは微分を実行中に実行される Savitzky-Golay スムージングを制御するものです。
6. 値の設定ダイアログは次のように設定されます。



7. OK をクリックしてダイアログを閉じ、列 C の結果を確認しましょう。列 G の値を変更して出力を変えてみてください。

Note: 多項式の次数は 1 から 9 までです。

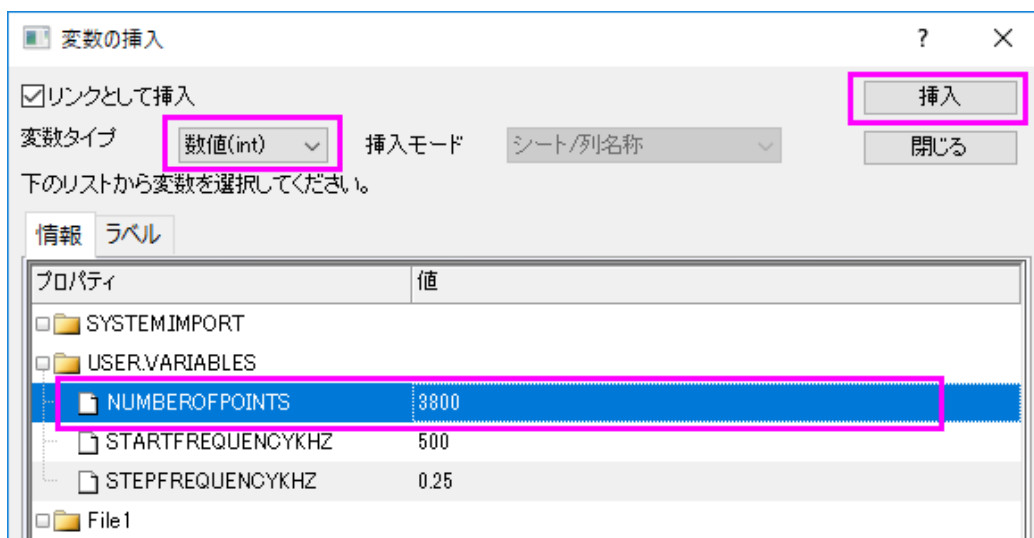


ワークシートに表示されたグラフが最初に作成され、セルのグループを統合してワークシートに埋め込まれました。

ワークブックのメタデータの変数を使用する

インポートウィザードを使用してデータをインポートするときに保存された変数や、ワークブックに保存されているメタデータを参照して、列の値を計算することができます。

1. \\Samples\Data Manipulation\Setting Column Values.OPJ を開くか、そのまま作業を続け、プロジェクトエクスプローラで **Worksheet Metadata** サブフォルダに移動します。
2. 列 A を選択し、右クリックして**挿入**メニューオプションを選択します。列 A の左側に新しい列が挿入されます。
3. 最初の列(この新しく挿入された列)を選択し、右クリックします。そして、**列値の設定**メニューを選択し、値の設定ダイアログを開きます。
4. **変数: 変数情報の追加**を選択し、**変数の挿入**ダイアログを開きます。**変数タイプ**ドロップダウンリストから **数値(int)** を選択します。USER.VARIABLES ノードを広げます。**NUMBEROFPOINTS** 行をクリックして選択し、**値**を **3800** に設定します。**挿入**ボタンをクリックして、**実行前の処理スクリプト**パネルに変数を挿入します。



5. 次に、**変数タイプ**を**数値(double)**にセットします。**Shift** キーを押しながら、**StartFrequencyKHz** および **StepFrequencyKHz** の両方を選択し、**挿入**ボタンを押してこれら 2 つの変数を挿入します。**閉じる**ボタンをクリックしてダイアログを閉じます。
6. 上部の列式パネルで、 $\{d1:d2:d1 + (n1-1)* d2\}$ を入力し、OK ボタンを押してデータを生成し、ダイアログを閉じます。列には度数が入力されます。

7. 1列・2列目を選択し、右クリックして列のXY属性の設定:XYと選択し、それぞれの列の属性をXとYに変更します。1列目のロングネームを **Frequency** に変更するとワークシートは次のようになります。

	C1(Y)	A(X)	B(Y)
ロングネーム		Real	Imaginary
スパークライ			
F(x)=	{d1:d2:d1+(n1-1)*d2}		
1	500	6.35	-4.39
2	500.25	5.98	-4.27
3	500.5	5.86	-3.91
4	500.75	6.23	-3.66
5	501	6.47	-3.42
6	501.25	6.47	-3.3
7	501.5	6.71	-2.69
8	501.75	6.1	-3.05
9	502	5.74	-2.32
10	502.25	6.23	-2.2
11	502.5	6.1	-1.71
12	502.75	5.86	-2.08
13	503	5.74	-2.08
14	503.25	5.37	-2.2
15	503.5	6.1	-1.89

セル値の設定

セル編集モードでは、以下のように、セル(データセルまたはユーザー定義パラメータ行セル)に等号 "=" で始まるセル数式を入力できます。

Morning	Evening	Stats	
(°F)			
		Morning	Evening
		=count(A,1)	55
97.09975	97.08043	98.23468	98.15735
97.2	97.09497	0.4952297	0.50379
97.29991	97.46701		
97.40002	97.53114		
--	97.51223		
--	97.40901		

数式を入力すると、編集モードを終了(インプレース編集または編集:編集モード)して、結果のセル値を表示します。

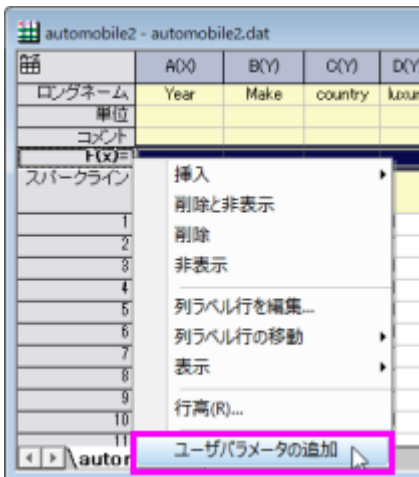
Origin でセル式がどのように機能するかを例を挙げて説明しましょう:

1. 新しいワークブックを開きます。

2. <Origin Program Folder>Samples\Statistics フォルダにあるサンプルデータ "automobile2.dat"をワークブックにインポートします。

列名	A(I)	B(I)	C(I)	D(I)	E(I)	F(I)	G(I)	H(I)	I(I)
ロングネーム	Year	Make	country	luxury	Power	0 ⁶⁰ mph	Weight	Gas Mileage	Engine Displacement
単位					kw	sec	kg	mpe	cc
コメント									
F(x)=									
スパークライン									
1	1992	Buick	US	N	132	14	2238	11	5736.5
2	1992	Acura	Japan	Y	154	12	2324	11	5212
3	1992	GMC	US	N	158	13	1531	10	5900.4
4	1992	Chrysler	US	N	132	10	2088	12	6277.4
5	1992	Kia	Korea	N	121	12	1202	12	5736.5
6	1992	Suzuki	Japan	N	106	10	1417	14	5736.5
7	1992	Volvo	Sweden	Y	95	14	1661	13	5031.7

3. ヘッダ行にある "F(x)="セルを右クリックし、コンテキストメニューからユーザパラメータを追加を選択してユーザパラメータを追加します



4. ここでは、2つのユーザパラメータを追加し、それらのパラメータ名として Mean と Std Dev を別々に入力しましょう。次に、このワークシートの最後にもう1列を追加し、ロングネームに列として Power/Engine Displacement と入力します。

列名	A(I)	B(I)	C(I)	D(I)	E(I)	F(I)	G(I)	H(I)	I(I)	J(I)
ロングネーム	Year	Make	country	luxury	Power	0 ⁶⁰ mph	Weight	Gas Mileage	Engine Displacement	Power/Engine Displacement
単位					kw	sec	kg	mpe	cc	
コメント										
F(x)=										
Std Dev										
Mean										
スパークライン										
1	1992	Buick	US	N	132	14	2238	11	5736.5	
2	1992	Acura	Japan	Y	154	12	2324	11	5212	
3	1992	GMC	US	N	158	13	1531	10	5900.4	
4	1992	Chrysler	US	N	132	10	2088	12	6277.4	
5	1992	Kia	Korea	N	121	12	1202	12	5736.5	
6	1992	Suzuki	Japan	N	106	10	1417	14	5736.5	
7	1992	Volvo	Sweden	Y	95	14	1661	13	5031.7	
8	1992	Mercedes	Germany	Y	132	14	2208	12	5736.5	
9	1992	Acura	Japan	Y	128	13	1412	12	5736.5	

5. 編集: 編集モードを選択すると、編集モードに切り替わります。そして、セルの Mean と Power 列の Std Dev に、それぞれ $mean(This)$ と $stddev(this)$ を入力します。編集が完了したら、セルの外側をクリックしてセル編集モードを終了

し、編集:編集モードメニュー項目を再度選択して、セル式の結果を表示します。

	A(X)	B(Y)	C(Y)	D(Y)	E(Y)	F(Y)	G(Y)
ロングネーム	Year	Make	country	luxury	Power	0~60 mph	Weight
単位					kw	sec	kg
Std Dev					=stddev(This)		
Mean					79.85		
コメント							
F(x)=							
スパークライン							
1	1992	Buick	US	N	132	14	2238
2	1992	Acura	Japan	Y	154	12	2324
3	1992	GMC	US	N	158	13	1531
4	1992	Chrysler	US	N	132	10	2088
5	1992	Kia	Korea	N	121	12	1202

Note: 変数"This"の意味については、こちらのページをご参照ください。

- "Power"列の Mean セルのクリックして選択し、このセルの右下隅にカーソルを合わせます。カーソルが十字+に変ったら、この "+"ハンドルをつかんでマウスで水平方向に列 "Engine Displacement"までドラッグします。カーソルを離すと、この行の他のセルがいくつかの結果値で満たされることがわかります。あるいは、「+」ハンドルをダブルクリックして、式を列(Power)の右側にあるすべての Mean にコピーすることもできます。

	A(X)	B(Y)	C(Y)	D(Y)	E(Y)	F(Y)	G(Y)	H(Y)	I(Y)	J(Y)
ロングネーム	Year	Make	country	luxury	Power	0~60 mph	Weight	Gas Mileage	Engine Displace	Power/Engine Displacement
単位					kw	sec	kg	mpg	cc	
コメント										
F(x)=										
Std Dev					28.07561					
Mean					79.85					
1	1992	Buick	US	N	132	14	2238	11	5736.5	

	A(X)	B(Y)	C(Y)	D(Y)	E(Y)	F(Y)	G(Y)	H(Y)	I(Y)	J(Y)
ロングネーム	Year	Make	country	luxury	Power	0~60 mph	Weight	Gas Mileage	Engine Displace	Power/Engine Displacement
単位					kw	sec	kg	mpg	cc	
コメント										
F(x)=										
Std Dev					28.07561					
Mean					79.85	15.58824	1337.75882	21.74706	3408.43735	
1	1992	Buick	US	N	132	14	2238	11	5736.5	

- これらの Mean セルをダブルクリックすると、同じ式で全て入力されています。= mean (this)

E(Y)	F(Y)	G(Y)	H(Y)	I(Y)
Power	0~60 mph	Weight	Gas Mileage	Engine Displacement
kw	sec	kg	mpg	cc
28.07561				
79.85	15.58824	1337.75882	21.74706	=mean(This)
132	14	2238	11	5736.5

- 標準偏差を計算するには、Std Dev 行で同じことを行います。

9. 先ほど追加した最後の列に移動し、最初のセルに $E1/I1$ と入力します。

冊	A(Y)	B(Y)	C(Y)	D(Y)	E(Y)	F(Y)	G(Y)	H(Y)	I(Y)	J(Y)
ロングネーム	Year	Make	country	luxury	Power	0~60 mph	Weight	Gas Mileage	Engine Displace	Power/Engine Displacement
単位					kw	sec	kg	mpg	cc	
コメント										
F(x)=										
Std Dev					28.07561	3.14842	341.95962	5.89141	1719.2832	
Mean					79.85	15.58824	1337.75882	21.74706	3408.43735	
1	1992	Buick	US	N	132	14	2238	11	5736.5	0.02301
2	1992	Acura	Japan	Y	154	12	2324	11	5212	

Note: ここで、E1 は col(E) の最初のセルを意味し、I1 は col(I) の最初のセルを意味します。この式については、こちらのページをご参照ください。

10. カーソルを離して割り算を実行します。ステップ 6 と同じ方法で、この "+" ハンドルをつかんで、この列の最後のセルにマウスで垂直方向にドラッグします (ヒント: セルの右下にマウスポインタを置いた場合、カーソルが「+」記号に変わります。この「+」記号が表示されたら、ダブルクリックして数式を列の最後まで拡張します。(これはマウスでドラッグするよりも速くて簡単です))

冊	A(Y)	B(Y)	C(Y)	D(Y)	E(Y)	F(Y)	G(Y)	H(Y)	I(Y)	J(Y)
ロングネーム	Year	Make	country	luxury	Power	0~60 mph	Weight	Gas Mileage	Engine Displace	Power/Engine Displacement
単位					kw	sec	kg	mpg	cc	
コメント										
F(x)=										
Std Dev					28.07561	3.14842	341.95962	5.89141	1719.2832	
Mean					79.85	15.58824	1337.75882	21.74706	3408.43735	
1	1992	Buick	US	N	132	14	2238	11	5736.5	0.02301
2	1992	Acura	Japan	Y	154	12	2324	11	5212	
3	1992	GMC	US	N	158	13	1531	10	5900.4	
4	1992	Chrysler	US	N	132	10	2088	12	6277.4	
5	1992	Kia	Korea	N	121	12	1202	12	5736.5	
6	1992	Suzuki	Japan	N	106	10	1417	14	5736.5	
7	1992	Volvo	Sweden	Y	95	14	1661	13	5031.7	
8	1992	Mercedes	Germany	Y	132	14	2208	12	5736.5	
9	1992	Acura	Japan	Y	128	13	1412	12	5736.5	

11. カーソルを離して、各行で col(E)/col(I) のすべての除算結果を取得します。

E(Y)	F(Y)	G(Y)	H(Y)	I(Y)	J(Y)
Power	0~60 mph	Weight	Gas Mileage	Engine Displacement	Power/Engine Displacement
kw	sec	kg	mpg	cc	
28.07561	3.14842	341.95962	5.89141	1719.2832	
79.85	15.58824	1337.75882	21.74706	3408.43735	
132	14	2238	11	5736.5	0.02301
154	12	2324	11	5212	0.02955
158	13	1531	10	5900.4	0.02678
132	10	2088	12	6277.4	0.02103
121	12	1202	12	5736.5	0.02109
106	10	1417	14	5736.5	0.01848
95	14	1661	13	5031.7	0.01888
132	14	2208	12	5736.5	0.02301
128	13	1412	12	5736.5	0.02231
124	17	1518	13	5900.4	0.02102
110	10	1810	13	5212	0.02111
116	14	1809	13	5752.9	0.02216

編集: 編集モードメニューを選択すると、これらのセル式をすべて確認および編集できます。

E(Y)	F(Y)	G(Y)	H(Y)	I(Y)	J(Y)
Power	0~60 mph	Weight	Gas Mileage	Engine Displacement	Power/Engine Displacement
kw	sec	kg	mpg	cc	
=stddev(This)	=stddev(This)	=stddev(This)	=stddev(This)	=stddev(This)	
=mean(This)	=mean(This)	=mean(This)	=mean(This)	=mean(This)	
132	14	2238	11	5736.5	=E1/I1
154	12	2324	11	5212	=E2/I2
158	13	1531	10	5900.4	=E3/I3
132	10	2088	12	6277.4	=E4/I4
121	12	1202	12	5736.5	=E5/I5
106	10	1417	14	5736.5	=E6/I6
95	14	1661	13	5031.7	=E7/I7
132	14	2208	12	5736.5	=E8/I8
128	13	1412	12	5736.5	=E9/I9
124	17	1518	13	5900.4	=E10/I10
110	10	1810	13	5212	=E11/I11
116	14	1899	13	5752.9	=E12/I12
128	17	1696	14	5900.4	=E13/I13
110	15	1488	13	5212	=E14/I14
94	15	1536	13	4949.8	=E15/I15
145	17	1426	12	7031.3	=E16/I16
152	9	1542	12	7031.3	=E17/I17
117	15	1754	12	5736.5	=E18/I18
147	18	2140	10	5031.7	=E19/I19
110	13	1437	11	6556	=E20/I20
165	14	1730	12	7457.4	=E21/I21
139	15	1680	13	6556	=E22/I22
122	12	1952	12	6556	=E23/I23
128	13	2005	13	6556	=E24/I24

Note: さらに、行と列にまたがって式を拡張することもできます。式でセルの値を設定する方法の詳細については、こちらのページを参照してください。

4.5.1. ワークシートデータ操作

ワークシートクエリ

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ダイアログの概要](#)
- [4 条件を定義する](#)
 - [4.1 時間データの抽出](#)
 - [4.2 文字列の抽出](#)
 - [4.3 時間データの抽出](#)

サマリー

このチュートリアルでは、ワークシートクエリダイアログの使用方法について説明しています。

必要な Origin のバージョン:Origin 2019b


学習する項目

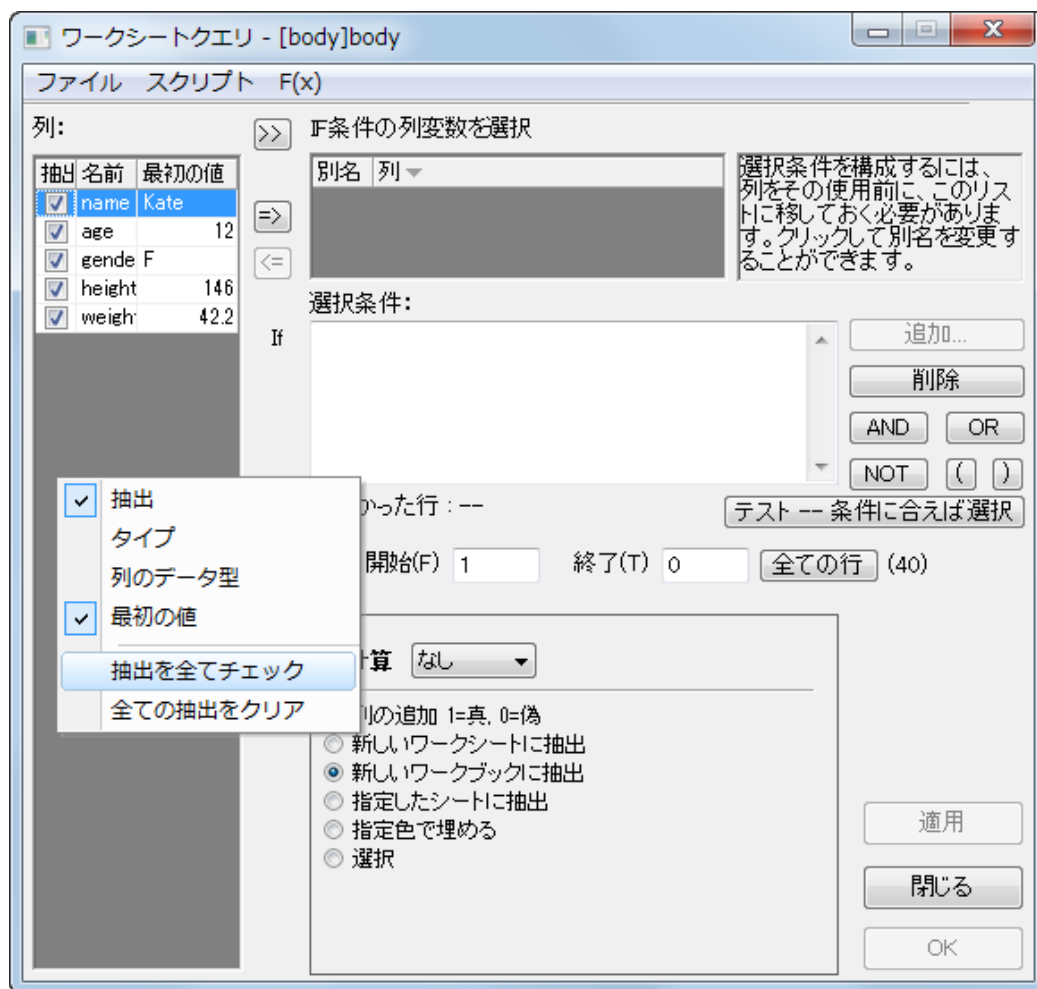
このチュートリアルでは、以下の項目について解説します

- 数値および時間データを抽出する
- 抽出条件で別名を使う
- 抽出条件で LabTalk 関数を使う

ダイアログの概要



(A) アクティブなワークブックの**スプレッドシートセル表記 (SCN)**が OFF の時(ワークブックの左上にこのアイコン が表示されます。)または、(b) SCN が ON になっていても、ワークシートクエリの右上で **Use Alias** ボックスがチェックされているとき、ワークシートクエリダイアログボックスは次の画像の状態とは若干異なるものとなります。ワークシートクエリダイアログボックスはバージョン **2019b** で列の命名を柔軟に行うため修正されました。このチュートリアルでは、列エイリアスの定義を紹介します。**If 条件の列変数を選択**もご参照ください。



ワークシートクエリダイアグラムには主要なパネルが2つあります。

- 左のパネルはアクティブなワークシートにある列を一覧します。左のパネルを右クリックして、どの列のプロパティを表示するかを選びます。(例 フォーマット、最初の値など)抽出列がチェックされている列のみが、ダイアログボックス OK をクリックしたときに出力されます。
- 右側のパネルでは、抽出条件を設定したり、テストすることができます。SCN がオフになっている、または Use Alias ボックスにチェックを入れている場合、パネルに条件を抽出したい列を選択し、=> ボタンをクリックして IF 条件の列変数を選択ボックスに移動させます。移動できたら、条件を定義します。エイリアスではなく、列の名前やインデックスを使用する場合は、条件を直接定義します。

条件を定義する

数値データの抽出

1. 新しいワークブックを開き、\Samples\Statistics\automobile.dat ファイルを開きます。

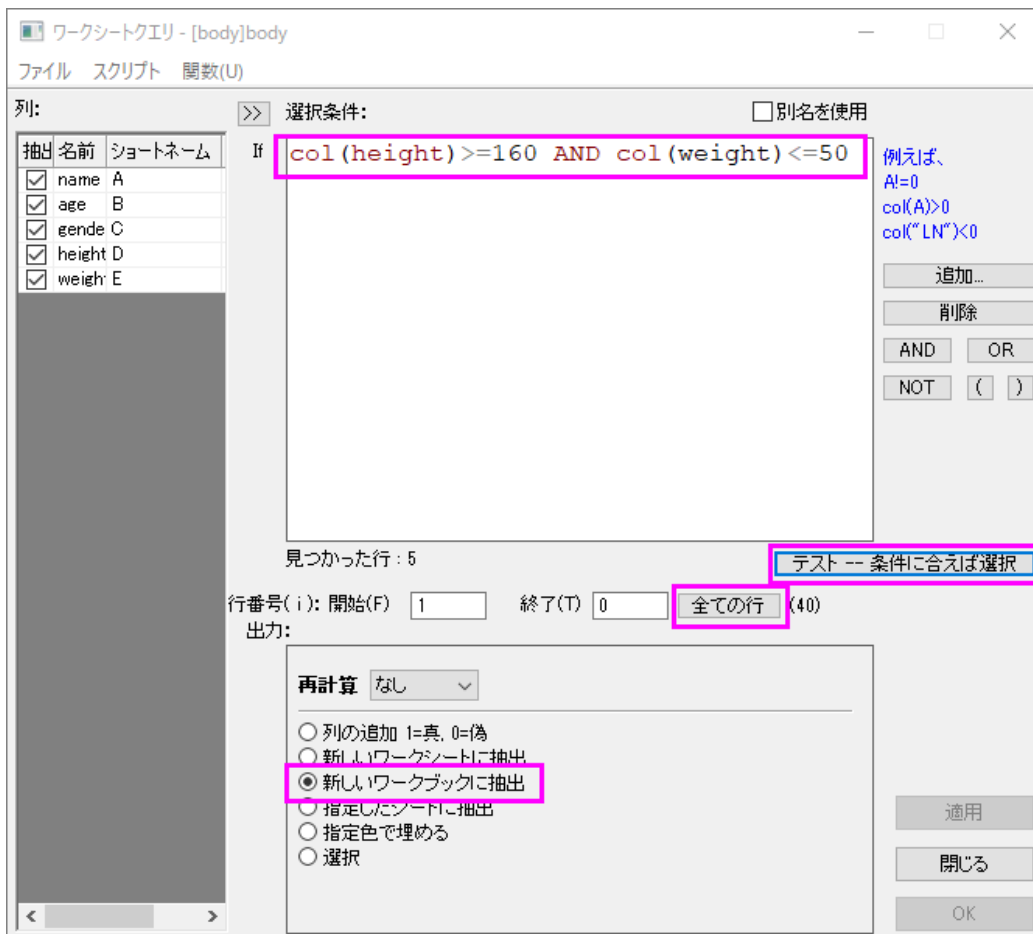
2. **ワークシート:** ワークシートクエリを選択して、ワークシートクエリダイアログボックスを開きます。
有効なシンタックスがわかれば、直接**条件**ボックスに入力します。**条件**ボックス右側のボタンが、条件を入力する補助のために用意されています。さらに、**関数**メニューから関数と変数を挿入できます。
3. 身長が 160cm 以上の個人を取り出すには、条件ボックスに次のように入力します。

```
col (height) >=160
```

4. 複数の条件がある場合、論理演算子、**AND**、**OR**、**NOT** ボタンを使って、これらの条件を組み合わせることができます。体重が 50kg より小さいという条件を追加しましょう。**AND** ボタンをクリックして、**AND** の後に次を入力します。

```
col (weight) <=50
```

5. クエリは次のようになります。



6. クエリを確認するには、**すべての行**ボタンをクリックして全ての行を選択し(開始が 1 終了が 0 はシートの最後の行を示しています。)、**テスト -- 条件に合えば選択**をクリックしてクエリを確認します。クエリを確認すると、Origin は 5 つのレコードを返します。



7. 他の設定はデフォルトのままにして、OK ボタンをクリックします。5 つのレコードの入ったワークブックが新しく作成されます。

文字列の抽出

文字列を抽出する場合、文字列をダブルクォーテーションマーク " で囲む必要があります(例"California")。

1. 女性(F)だけを抽出するには、**条件**ボックスに次のように入力します。

```
col (gender) == "F"
```

2. **すべての行**ボタンをクリックして、**テスト -- 条件に合えば選択**をクリックします。18レコードが見つかったとメッセージが表示されます。
3. 他の設定をデフォルトのまま **OK** ボタンをクリックしてダイアログを閉じ、新しいワークブックに女性のデータを抽出します。

時間データの抽出

日付と時刻のデータは、Origin の内部では数値で保存されています。日付は数値の整数部分で、時刻は小数部分です。Origin では、int()および frac()関数を使って、数値の整数部と小数部を返すことができます。そして、Date(MM/DD/YY)と Time(HH:mm:ss)関数を使って、時刻データをユリウス通日に変換することができます。

1. ワークブックを空の状態にして、**データ: インポート: 単一 ASCII ファイル**を選び、<Origin プログラムディレクトリ>\Samples\Import and Export\Custom Date and Time.dat を選択します。A 列の日付-時間データは正しい日付-時間データ(数値データ)ではなく、文字列データとして扱われているため、左揃えで表示されています。

2. A 列を選択し、右クリックしプロパティを選びます。フォーマット = 日付、表示 = カスタム表示、カスタム表示に次のように入力します。

```
dd&apos; . &apos; MM&apos; . &apos; YYYY  
HH&apos; : &apos; mm&apos; : &apos; ss&apos; . &apos; ##
```

3. これで、A 列の日付-時間文字列を数値データにフォーマットします。
4. 次に、10:00:00 から 11:00:00 までの間のデータをワークシートから抽出します。ワークシート: ワークシートクエリをクリックして、条件ボックスに次のように入力します。

```
frac(A) > Time(10:00:00) AND frac(A) < Time(11:00:00)
```

5. 全ての行ボタンをクリックして、テスト -- 条件に合えば選択をクリックします。120 レコードが見つかったとメッセージが表示されます。
6. 他の設定をデフォルトのまま OK ボタンをクリックしてダイアログを閉じ、新しいワークブックに 10:00:00 から 11:00:00 までの間のデータを抽出します。



データの削減

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ステップ](#)
 - [3.1 等間隔な X にデータを削減](#)
 - [3.2 重複する X データを削減](#)
 - [3.3 重複する行を削減/結合](#)
 - [3.4 グループごとに削減](#)
 - [3.5 ワークシートの行を削減](#)

サマリー

Origin には、データフィルタやワークシートクエリといったデータ削減の機能の他に、行を削減するためのいくつかの X ファンクションによる、手法の異なるデータ削減機能が用意されています。

必要な Origin のバージョン: Origin 2015 SR0 以降


学習する項目

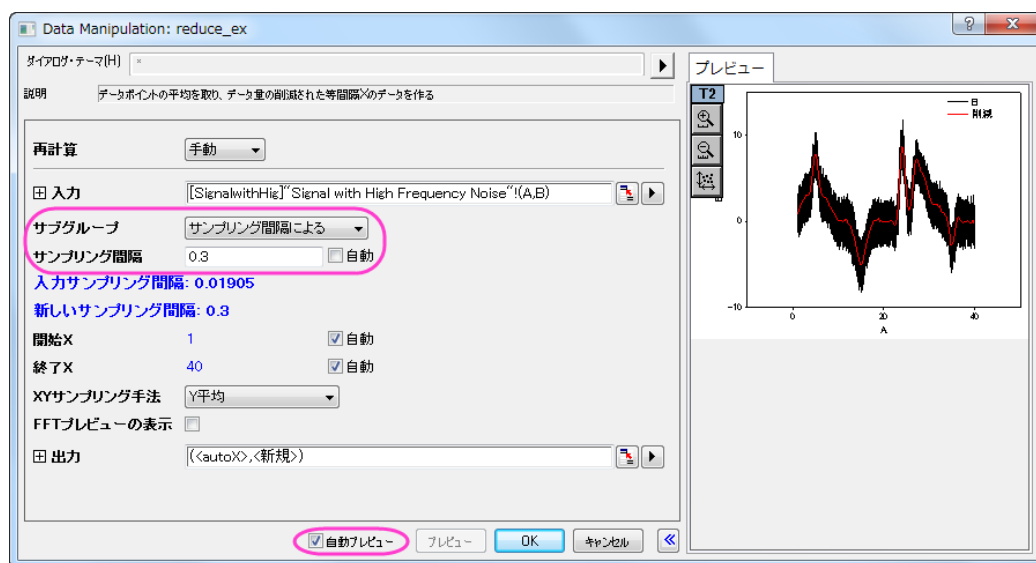
このチュートリアルで以下のことを行います：

- 等間隔な X にデータを削減
- 重複する X データをもつデータセットを削減
- グループごとに XY データを削減
- ワークシート行を削除

ステップ

等間隔な X にデータを削減

1. 新しいワークブックを作成し、 ボタンをクリックして、<Origin インストールフォルダ>\Samples\Signal Processing にある **Signal with High Frequency Noise.dat** をインポートします。
2. B 列を選択し、メインメニュー **解析：データ操作：データ削減：等間隔 X** を選択しダイアログを開きます。下図のように設定します。




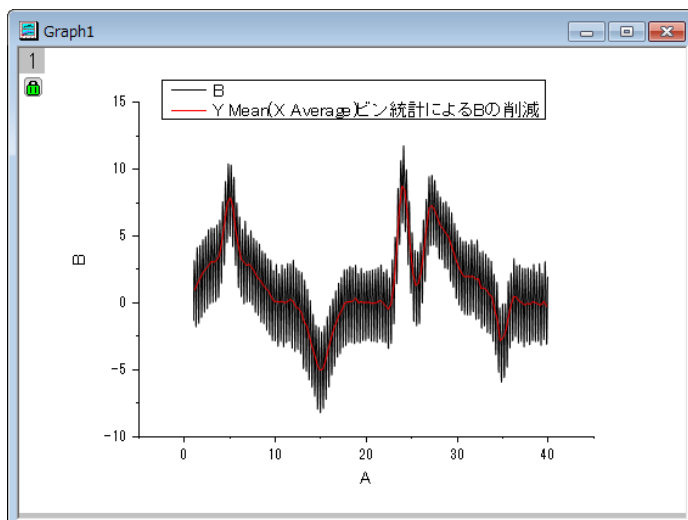
3. **OK** をクリックします。新たな列 (C 列) がワークシートに追加されました。この列にはサンプリング間隔が設定されています。列ヘッダをクリックして列を選択してから、**列：X 列の表示** を選択します。**X 列の表示：colshowx** ダイアログボックスで、**OK** をクリックしてサンプリング間隔を使用した X 列を生成します。サンプリング間隔が広く設定され、データが削減できたことがわかります。

SignalwithHig - Signal with High Frequency N...


	A(X1)	B(Y1)	D	C(Y#)
ロングネーム				ReduceEXY
単位				
コメント			Generated from Sampling Info of C	Y Mean(X Average)ビン統計によるBの削減
F(x)				
スパークライン				
121	3.28627	5.45477	37.15	0.01108
122	3.30532	4.93594	37.45	-0.1918
123	3.32438	4.35703	37.75	-0.03399
124	3.34343	3.87166	38.05	-0.12322
125	3.36248	3.41072	38.35	0.07485
126	3.38153	2.826	38.65	-0.00137
127	3.40059	2.05593	38.95	-0.12254
128	3.41964	1.17457	39.25	-0.17762
129	3.43869	0.40375	39.55	0.10425
130	3.45774	0.08745	39.85	-0.26257
131	3.4768	0.40962		
132	3.49585	1.28452		
133	3.5149	2.42692		
134	3.53395	3.65674		
135	3.553	4.83102		
136	3.57206	5.628		
137	3.59111	5.83541		
138	3.61016	5.55445		

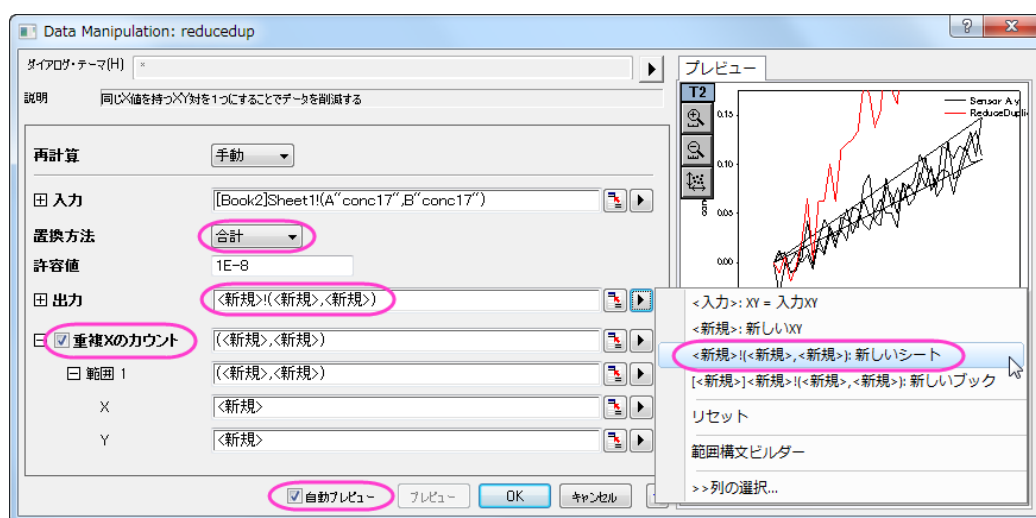
Signal with High Frequency Noise

4. **Ctrl** キーを押しながら B 列と C 列を選択し、 ボタンをクリックすると元データ(黒い線)と削減されたデータ(赤い線)がプロットされます。
5. データ量が大幅に削減されたのがわかります。



重複する X データを削減

1. 新しいワークブックを作成し、 ボタンをクリックしてインポートウィザードを開きます。<Origin インストールフォルダ>\Samples\Curve Fitting\にある、Step01.dat, Step02.dat, Step03.dat を選択します。インポートモードを**行の末尾に追加する**に設定し、インポートフィルタ **step** が適用されていることを確認します。完了ボタンをクリックして、ファイルをインポートします。
2. A,B 列を選択し、メインメニュー**解析:データ操作:データ削減:重複 X**を選択し、ダイアログを開きます。下図のように設定を変更します。

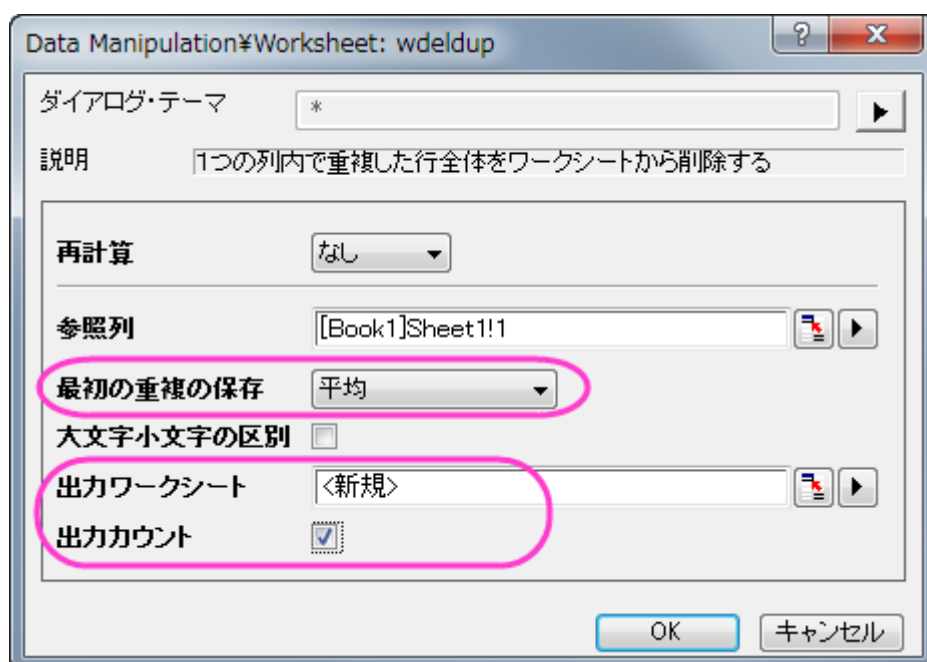


3. **OK** をクリックして設定を適用し、**Sheet2** では、重複した X データの数がそれぞれ 3 であることがわかります。削減されたデータでは、重複した X に対する Y データにはすべての Y データの合計値が入力されています。

	A(X1)	B(Y1)	C(X2)	D(Y2)
ロングネーム	ReduceDup	ReduceDup	DupX1	DupXCount
単位				
コメント		合計("conc 17"中)で重複を置き換え		
F(x)				
1	0	0	0	3
2	1.6	-0.01038	1.6	3
3	3.2	0.00635	3.2	3
4	4.8	-0.01886	4.8	3
5	6.4	-0.00427	6.4	3
6	8	0.02093	8	3
7	9.6	0.065	9.6	3
8	11.2	0.00214	11.2	3
9	12.8	0.06268	12.8	3
10	14.4	0.06262	14.4	3
11	16	0.10034	16	3
12	17.6	0.06281	17.6	3
13	19.2	0.11499	19.2	3
14	20.8	0.1214	20.8	3
15	22.4	0.12543	22.4	3
16	24	0.13385	24	3
17	25.6	0.18195	25.6	3
18	27.2	0.17139	27.2	3
19	28.8	0.138	28.8	3

重複する行を削減/結合

1. 前セクションで使用したデータの Sheet1 を開き、A 列を選択します。メインメニューのワークシート: 重複行の削除と選択し **wdeldup** ダイアログを開きます。重複の統合基準ドロップダウンリストで平均を選択し、出力ワークシートの右向きの三角形ボタンをクリックして<新規>:新しいシートを選択したあと、出力カウントにチェックを付けて **OK** をクリックします。



2. ワークシートの行全体が統合した行の平均値に削減されます。この統合は選択した列の重複を元に行われています。新しい列カウントがワークシート *wdeldup* 末尾に追加され、それぞれの X 値に対する重複データの数が出力されます。



	M(X7)	N(Y7)	O(X8)	P(Y8)	Q(Y8)
ロングネーム	conc23	conc23	conc24	conc24	カウント
単位					
コメント	Sensor G x	Sensor G y	Sensor H x	Sensor H y	
F(x)=					
1	1.2	0	1.4	0	3
2	2.8	0.11737	3	0.17448	3
3	4.4	0.27997	4.6	0.41884	3
4	6	0.40171	6.2	0.57955	3
5	7.6	0.51925	7.8	0.68073	3
6	9.2	0.63123	9.4	0.76457	3
7	10.8	0.69611	11	0.81905	3
8	12.4	0.75454	12.6	0.8929	3
9	14	0.82426	14.2	0.88688	3
10	15.6	0.84269	15.8	0.93241	3
11	17.2	0.86731	17.4	0.9457	3
12	18.8	0.90261	19	1.00258	3
13	20.4	0.93424	20.6	0.98714	3
14	22	0.94843	22.2	1.03746	3
15	23.6	0.95477	23.8	1.0414	3
16	25.2	0.98433	25.4	1.03587	3

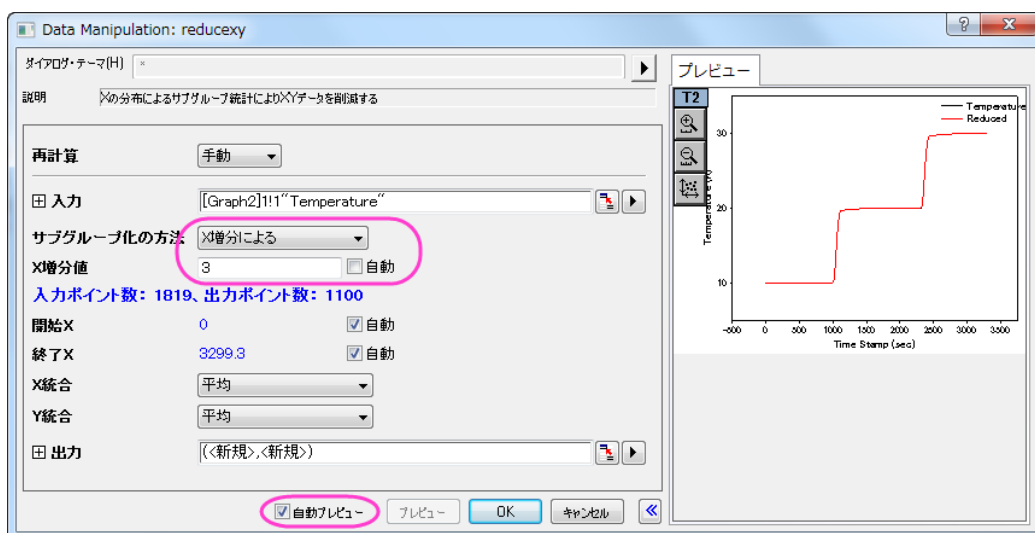


データ削減:重複 X ツールは、XY データセットへの使用に限られ、**重複行の削除**はシート内の全てのデータに対して使用できます。

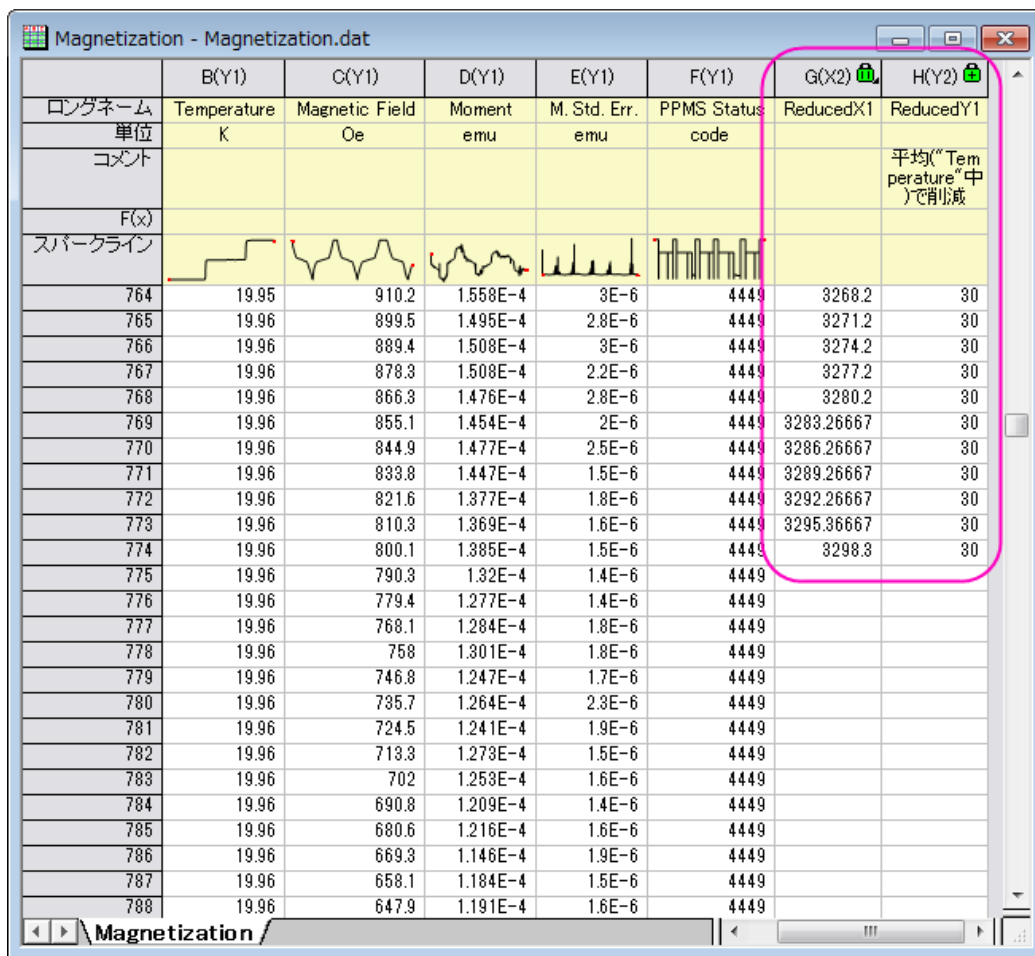
列の統計機能を使用して XYZ データ中の重複 XY データを削減することができます。詳細はクイックヘルプをご利用ください。

グループごとに削減

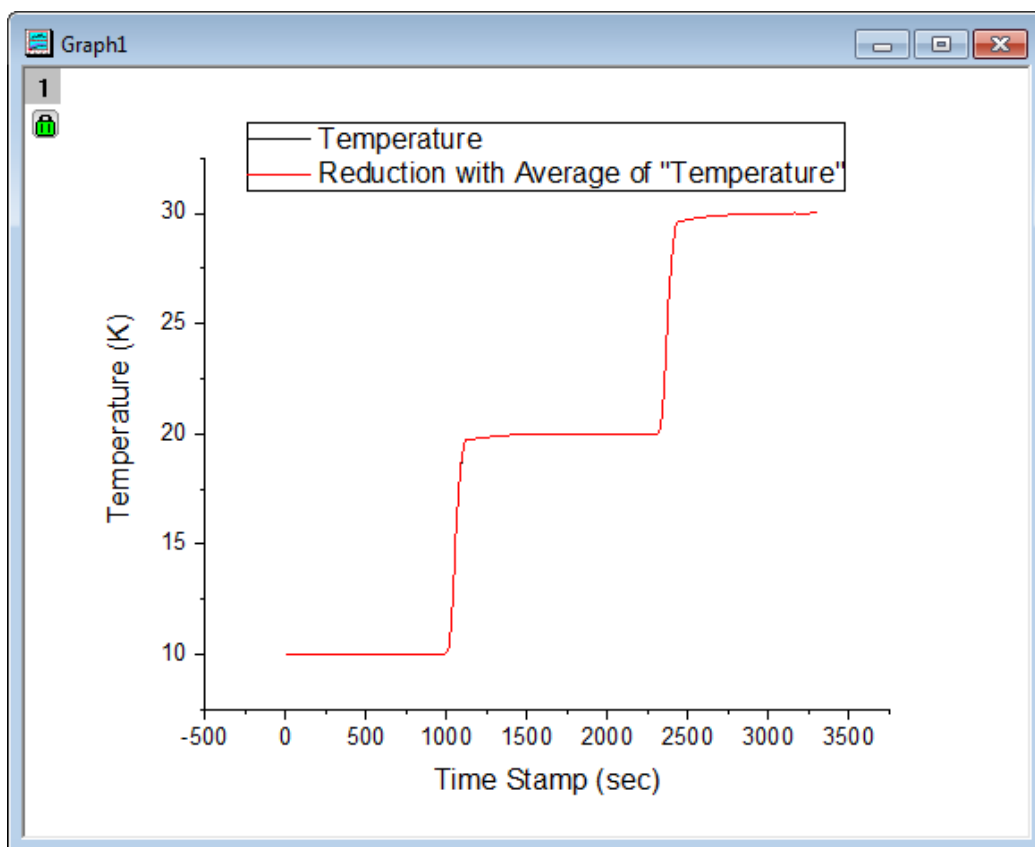
1. 新しいワークブックを作成し、 ボタンをクリックして <Origin インストールフォルダ>\Samples\Data Manipulation にある **Magnetization.dat** をインポートします。
2. A,B 列を選択して  ボタンをクリックし、折れ線図を作成します。
3. 作成したグラフをアクティブにし、メインメニューの**解析:データ操作:データ削減:クラスタ X** を選択し **reducexy** ダイアログを開きます。以下のように設定します。




4. **OK** をクリックして、データ削減を実行します。ソースシートの末尾に新しい列が 2 列追加され、削減されたデータが出力されます。

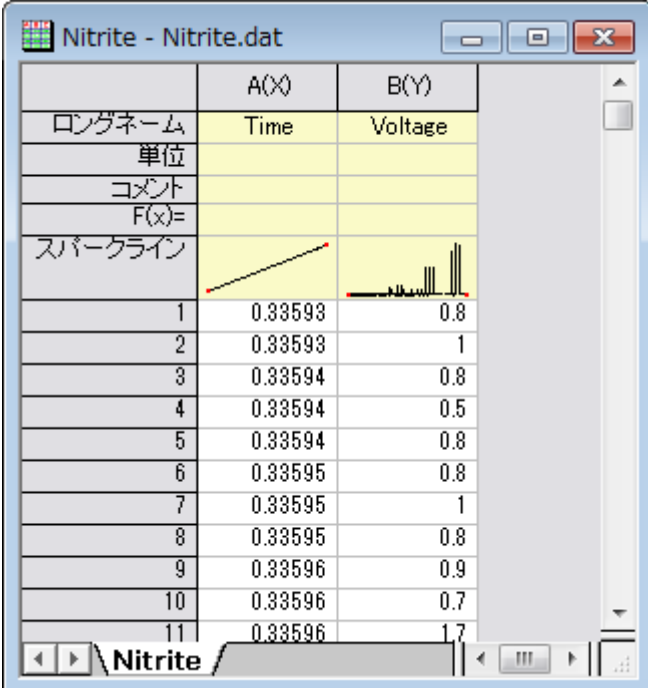


5. グラフにも削減されたXYデータのプロットが追加されます。



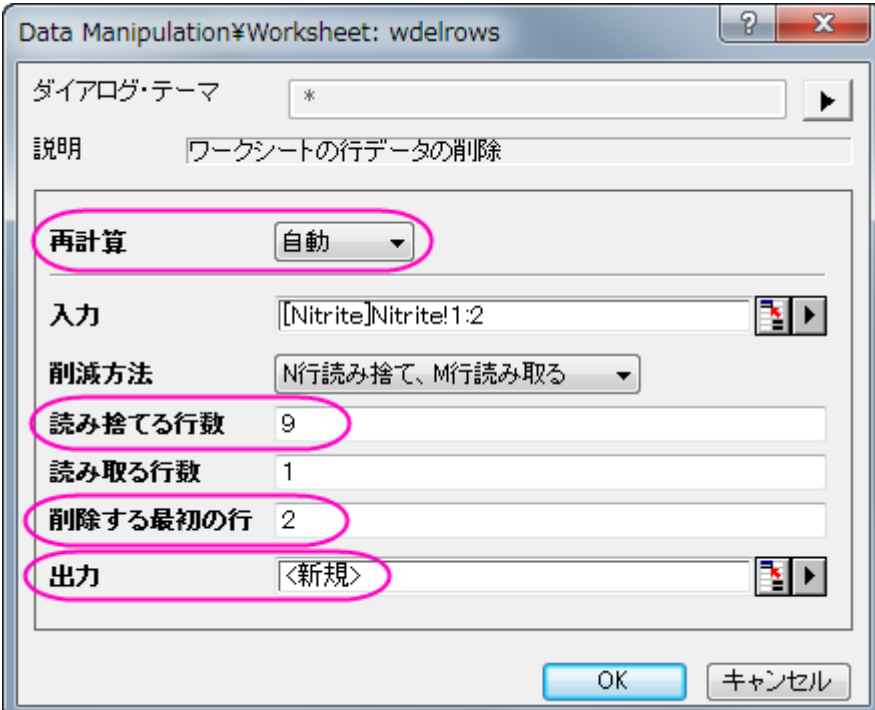
ワークシート行を削除

1. 新しいワークブックを作成し、 ボタンをクリックして<Origin インストールフォルダ>\Samples\Spectroscopy にある **Nitrite.dat** をインポートします。このファイルには 6392 のデータポイントがあります。



	A(X)	B(Y)
ロングネーム	Time	Voltage
単位		
コメント		
F(x)=		
スパークライン		
1	0.33593	0.8
2	0.33593	1
3	0.33594	0.8
4	0.33594	0.5
5	0.33594	0.8
6	0.33595	0.8
7	0.33595	1
8	0.33595	0.8
9	0.33596	0.9
10	0.33596	0.7
11	0.33596	1.7

- Nitrite ワークシートにある 2 列を選択して、メインメニューのワークシート: 行の削減と選択し、wreducerows ダイアログを開きます。ダイアログの設定を下図のようにします。



ダイアログ・テーマ *

説明 ワークシートの行データの削除

再計算 自動

入力 [Nitrite]Nitrite!1:2

削減方法 N行読み捨て、M行読み取る

読み捨てる行数 9

読み取る行数 1

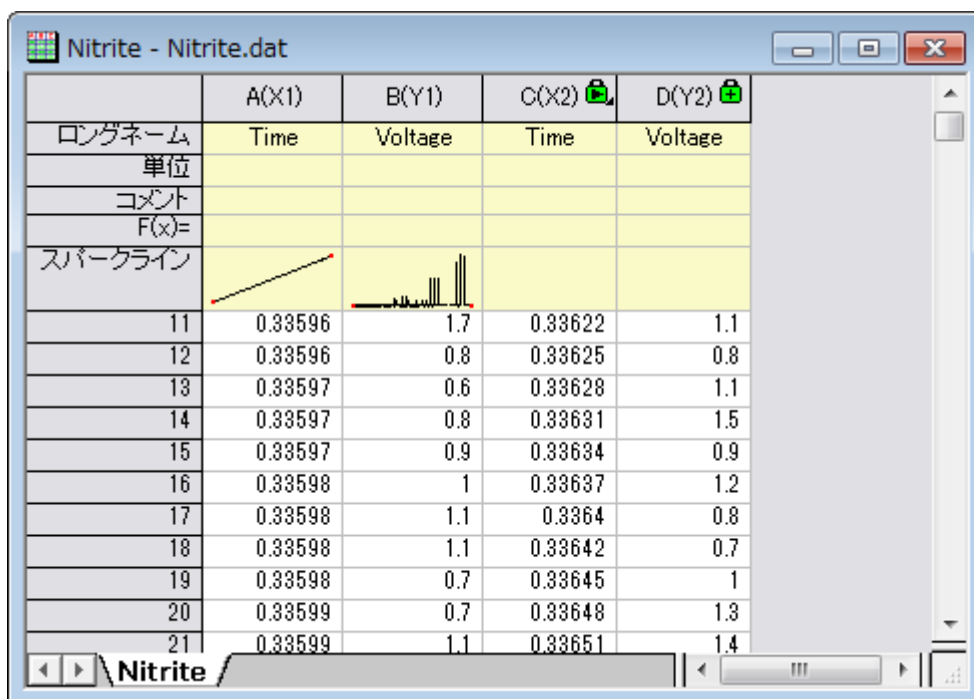
削除する最初の行 2


出力 <新規>

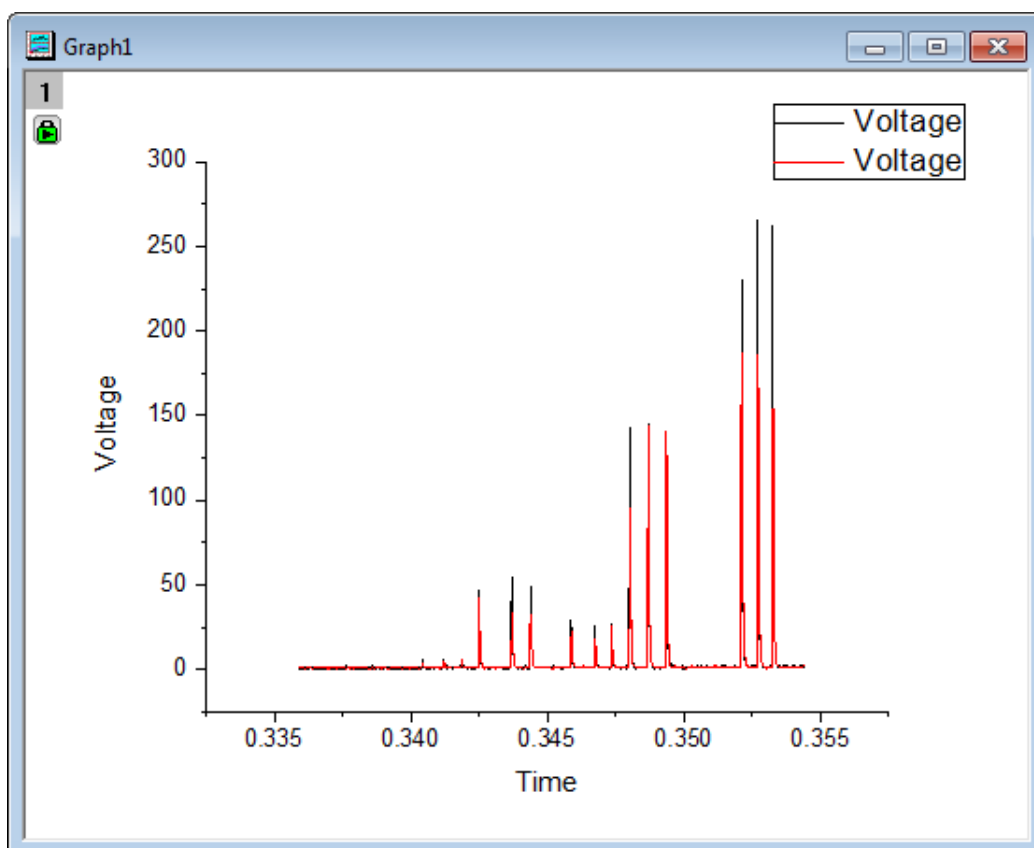
OK キャンセル

Note: 出力の右にある矢印をクリックして<新規>:新しい列を選択すれば、削減されたデータが新たな列に出力されます。

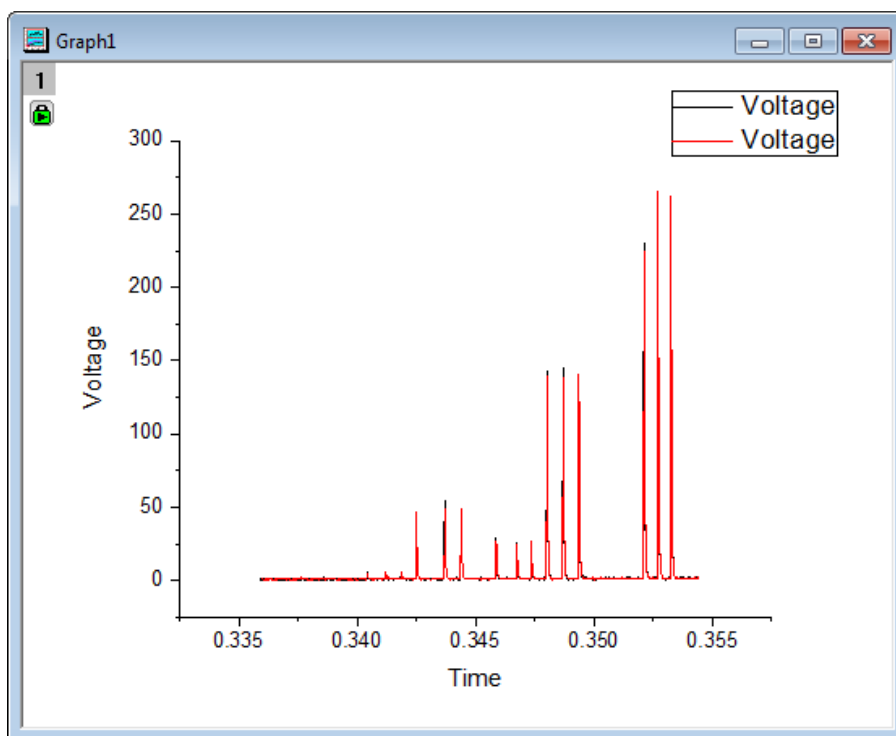
- OK ボタンをクリックすると、10 行ごとに最初の 1 行のみが出力されます。9 割のデータが削減され、残されたデータが新たな列に出力されます。



4. 全ての列を選択して  ボタンをクリックし、ソースデータ(黒線)と削減されたデータ(赤線)をともに作図します。



5. データ削減によりピークの高さが変化しています。データの形状を維持するために、より多くのデータを残す必要があることがわかります。Graph1にある緑の鍵のアイコンをクリックして**パラメータの変更**を選択し、**wreducerows** ダイアログを開きます。**読み捨てる行数**を**3**に変更し、**OK**をクリックします。
6. これで25%のデータが保持され、グラフの形状も維持できていることがわかります。



データフィルタ

サマリー

データフィルタはベースのツールで、ワークシートデータの行を削減し、それに対応して分析やグラフのデータで必要ではないものは非表示にします。数値、テキスト、日付/時間の3種類のデータ形式がサポートされています。




必要な Origin のバージョン: Origin 2015 SR0 以降

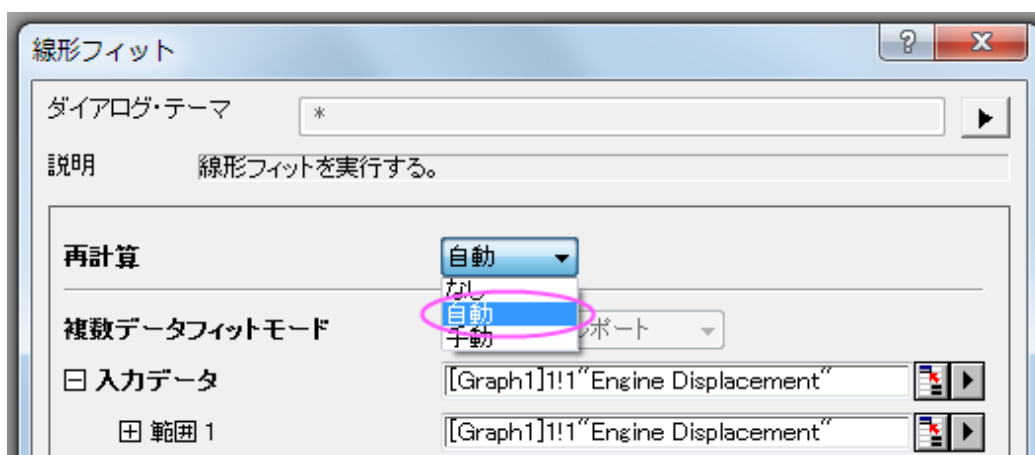
学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について解説します:

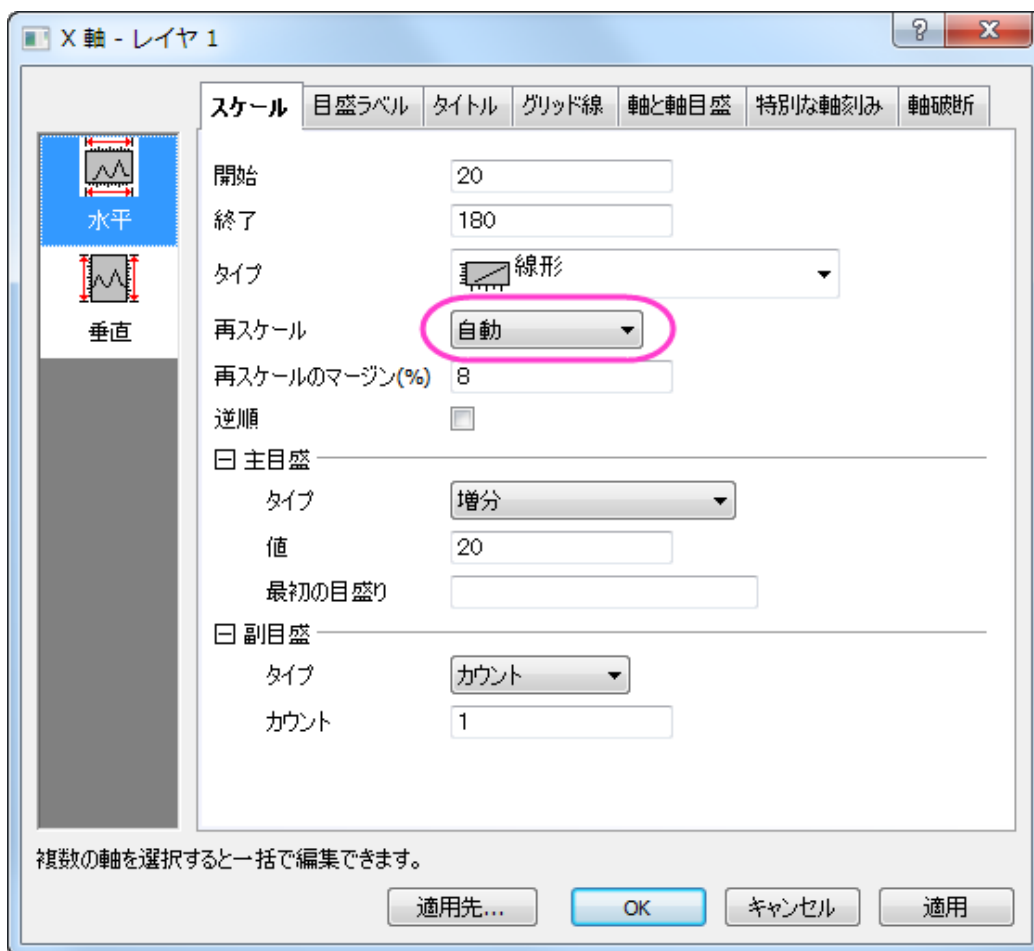
- データフィルタを使用してワークシートのデータを削減する
- 列フィルタを適用した時に、グラフや解析を自動更新する
- ワークシートにフローティンググラフを追加する

ステップ

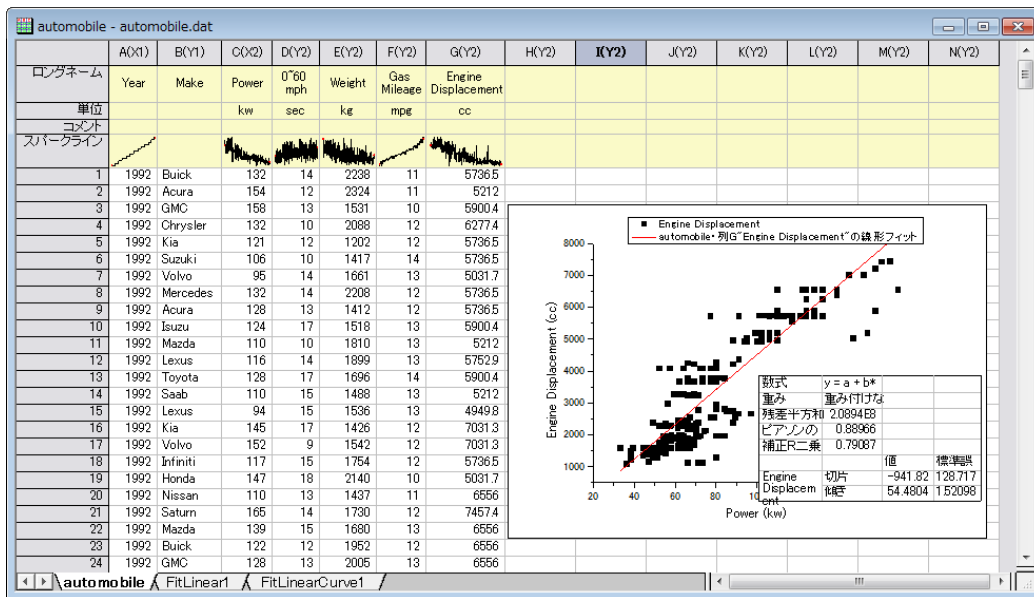
1. **新規ワークブック** ボタン  をクリックして新しいワークブックを作成します。**単一 ASCII のインポート** ボタン  をクリックし、**automobile.dat** ファイルを <Origin フォルダ>\Samples\Statistics\ のパスから開きます。これら 2 つのボタンは両方とも **標準ツールバー** にあります。
2. 列 C(Power) を選択し、右クリックで表示するコンテキストメニューから、**列 XY 属性の設定: X 列** と操作して X 属性に設定します。
3. 列 C と G を選択 (**Ctrl** キーを押しながらクリック) して、**2D グラフギャラリー** ツールバーで  ボタンをクリックし、散布図を作成します。
4. 作成したグラフをアクティブにし、**解析: フィット: 線形フィット** メニューを選択し、**線形フィット** ダイアログを開きます。このダイアログで、**再計算** モードを **自動** に設定し、解析結果を自動更新するようにします。それ以外の設定はデフォルトのまま **OK** をクリックして解析を実行します。





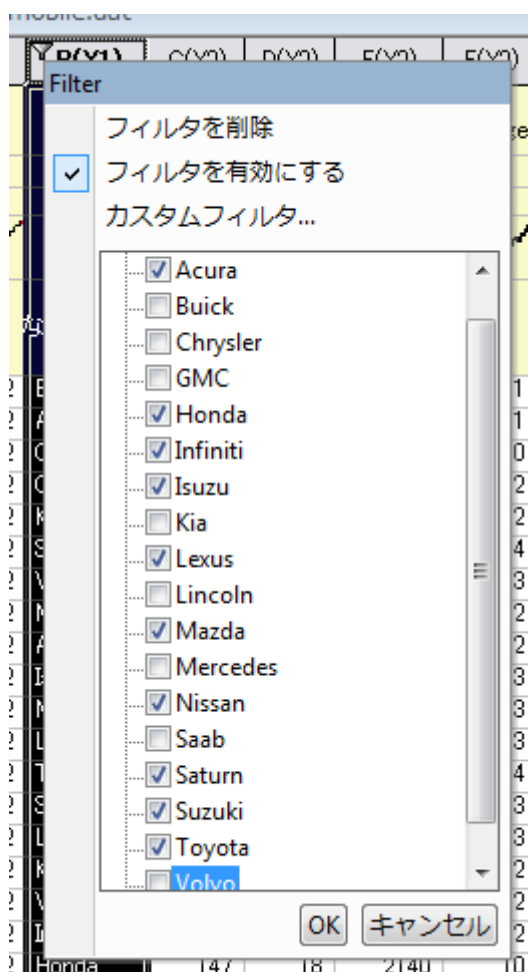
5. フィット曲線と結果表がグラフに追加されます。グラフをアクティブにし、X 軸をダブルクリックして **軸** ダイアログを開きます。**スケール** タブで **水平** アイコンを選び、**再スケール** を **自動** にします。同じ操作を Y 軸 (**垂直** アイコン) に対して行い、**再スケール** モードを **自動** にします。**OK** をクリックしてこの設定を適用して、ダイアログを閉じます。





- 元のワークシートの **automobile** に戻り、**列:新規列の追加**をクリックしてワークシートに7列を追加します。
- ワークシートの列の右側にある灰色の領域を右クリックして、コンテキストメニューの**グラフを追加...**を選択して**グラフブラウザ**を開きます。このダイアログで、左側のパネルで以前に作成したグラフを選択し、**OK**をクリックしてこのグラフをフローティンググラフとしてワークシートに追加します。作成したばかりの空のワークシート列にフローティングチャートをドラッグし、選択ハンドルを使用してサイズを変更します。



8. ワークシートデータツールバーからデータフィルタの追加/削除ボタン  をクリックして、空のデータフィルタを列 B に追加します。
9. B 列の列ヘッダのフィルタアイコン  をクリックし、Buick、Chrysler、GMC、Kia、Lincoln、Mercedes、Saab、Volvo のチェックを外してこれらのエントリを含むすべての行を非表示にします。これにより日本のメーカーのみが残ります。OK をクリックして、フィルタを適用します。ワークシートのデータ、グラフ、分析結果はそれに応じてすべて自動更新されます。



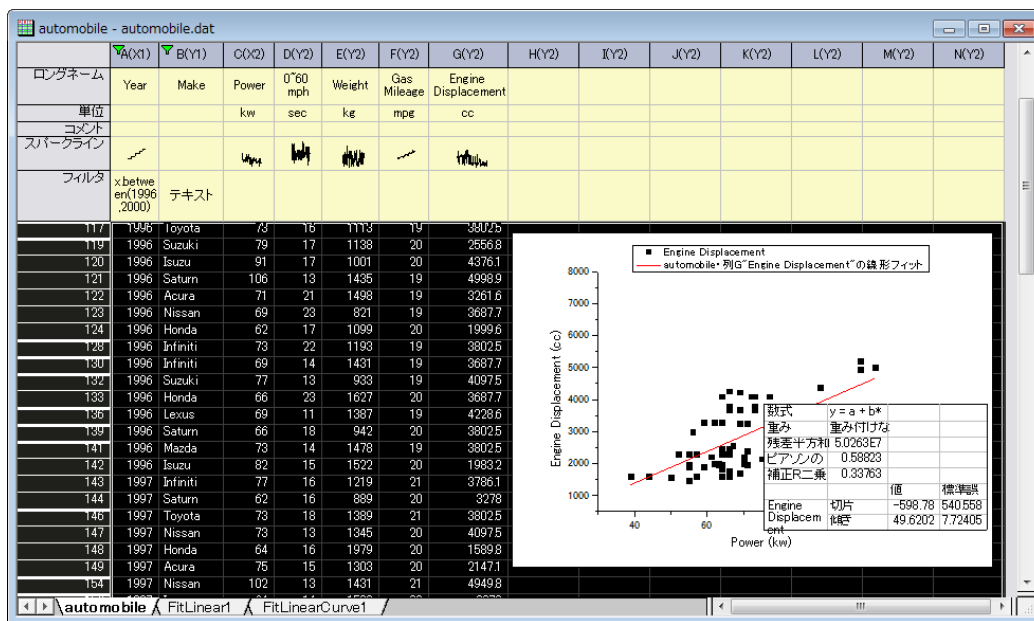
10. A 列の列ヘッダのフィルタアイコンをクリックして範囲を選択します。インポート時の列 A のデータタイプはデフォルトで数値であることに注意してください。範囲ダイアログのデフォルト設定のままで **OK** をクリックします。この列にデータフィルタが適用されます。
11. 列 A にあるフィルタアイコンを再度クリックし、今度はコンテキストメニューの**カスタムフィルタ** を選択してフィルタをカスタマイズします。条件を **x.between(1996,2000)** に設定して開始と終了値を対応させます。テストボタンをクリックしてこのテスト条件に合致するものの元データがハイライトされるので、データ削減のプレビューとして使えます。



この時点でワークシート全体を表示するには、**カスタムフィルタ**ダイアログを最小化してワークシートをスクロールします。再びダイアログで「最小化」ボタンをクリックすればダイアログは開き、追加設定を行えます。



12. **OK** ボタンをクリックしてフィルタの条件を適用すると、データ、グラフ、解析結果が更新されてデータ数が減ったことが確認できます。



Origin 2019 からは、ある列からデータフィルタをコピーして他の列のデータに貼り付けることができます。列のフィルタセルを右クリックしてコピーを選択します。またはフィルタセルをクリックして Ctrl+C キーでフィルタをコピーします。次に、対象列を選択し、Ctrl+V キーでフィルタを貼り付け、それらの列のデータに適用します。



分析におけるフィルタロック

サマリー

通常、フィルタを使用してデータの分析を行った場合、元のワークシートのデータのフィルタ条件を変更すると、分析結果やグラフの再計算が実行されます。

しかし、列をコピーとピボットテーブルには、再計算の鍵アイコンのコンテキストメニューに3つのワークシートフィルタオプションが存在します。これらのオプションは、解析実行後のデータフィルタ条件変更を反映するかどうか制御できます。

必要な Origin のバージョン: Origin 9.1 SR0

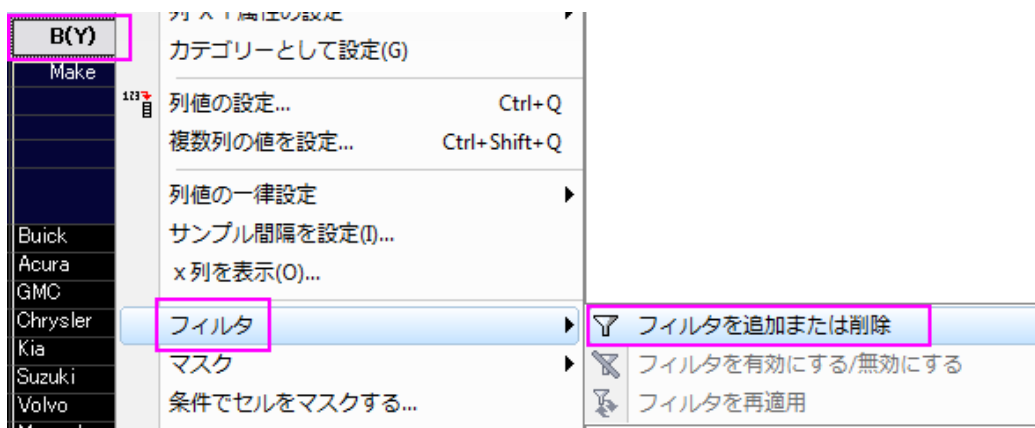
学習する項目


- 新しいワークブックまたはワークシートに列をコピーする
- コピーした列のデータフィルタ条件をロックする
- ソースワークシートにデータフィルタ条件を戻す

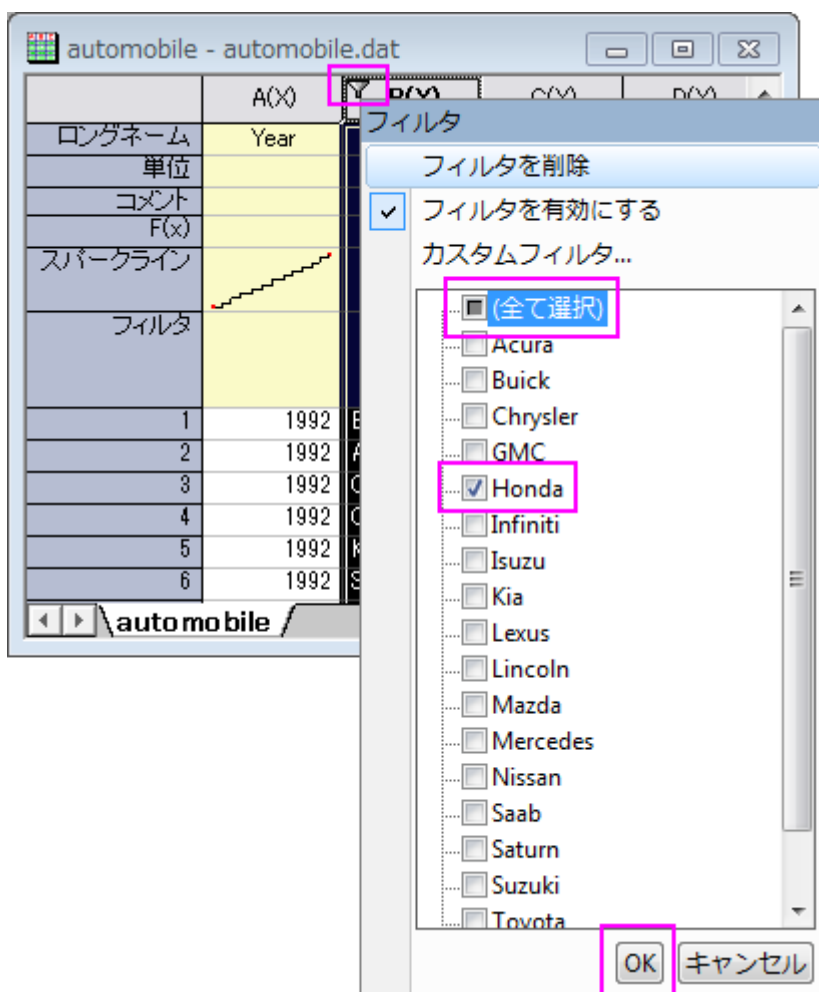
ステップ

1. <Origin プログラムフォルダ>\Samples\Statistics にある Origin のサンプルファイル *automobile.dat* をインポートします。

2. **Make** 列を選択後に右クリックし、**フィルタ:フィルタを追加または削除**をコンテキストメニューで選択します。あるいは、ワークシートデータ操作ツールバーのフィルタボタンをクリックします。

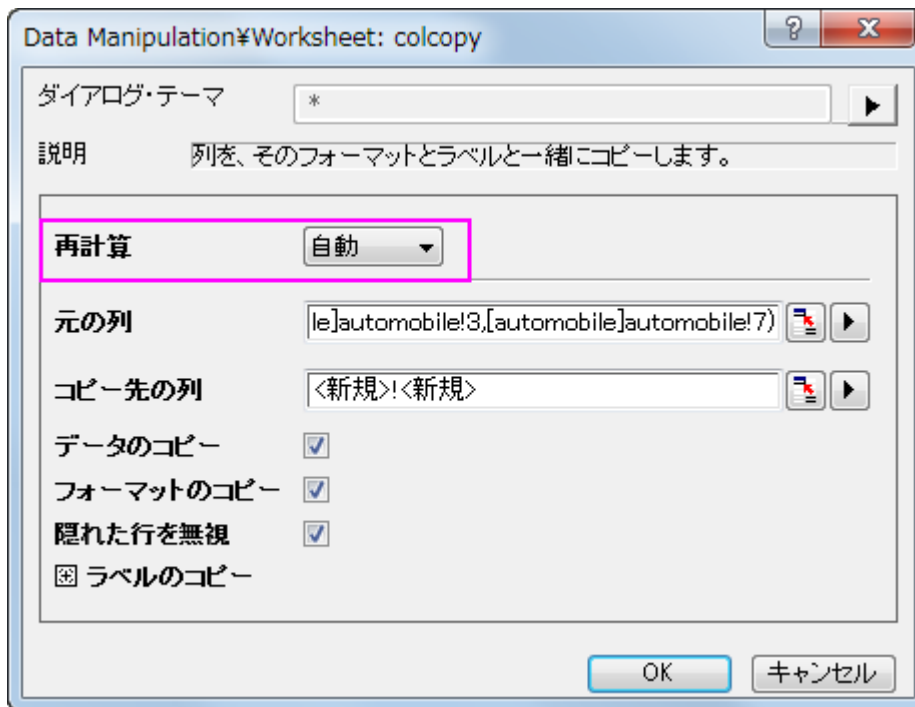


3. **Honda** のデータのみを表示するには、列の 1 行目のセル左上に表示されるフィルタアイコン  をクリックします。**全て選択**をクリックして全てのチェックを外します。**Honda** を選択します。**OK** ボタンをクリックします。



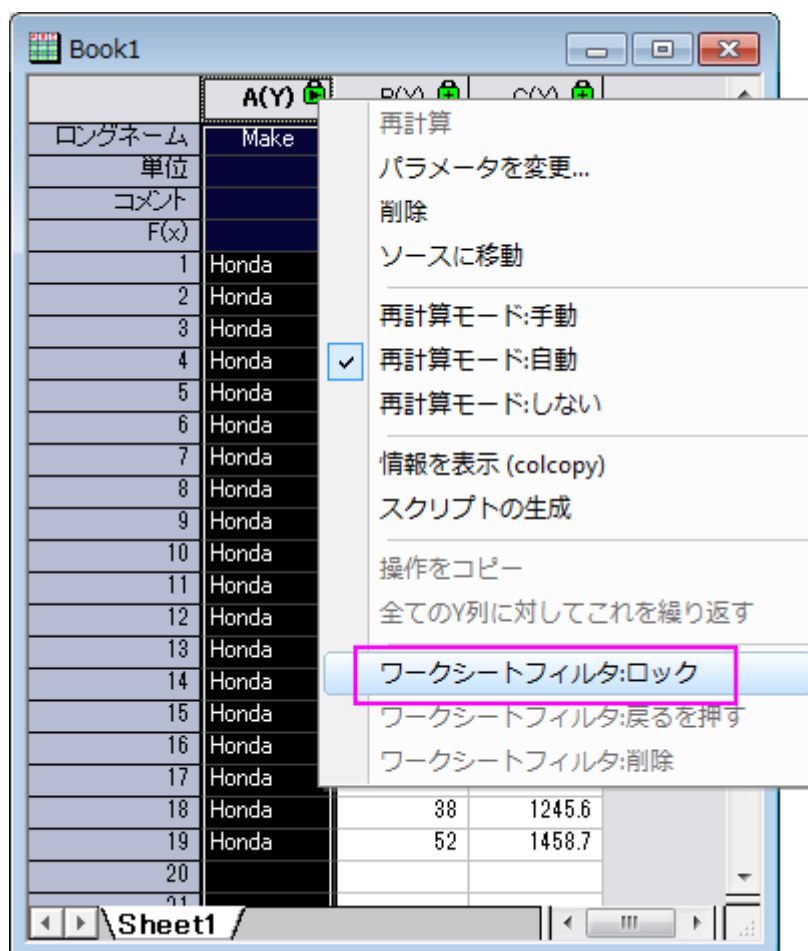
4. 列を別のワークシートにコピーするには、Ctrl キーを押しながら **Make**、**Power**、**Engine Displacement** 列をクリックして選択します。そして、選択した列上で右クリックし、ショートカットメニューから**列をコピー**を選択します。

5. **colcopy** ダイアログで、**再計算**ドロップダウンリストから**自動**を選択します。**コピー先の列**が同じワークブックの新しいワークシートに設定されていることを確認してください。列をコピーした新しいワークシートが作成されます。



6. コピーしたワークシートのタブを空欄になっている Origin のワークスペースにドラッグします。この操作で、新しいワークブックが作成されます。これにより、コピーしたデータと元のデータを横に並べて比較することができます。

7. コピーした列 1 行目にある左上の再計算を示す緑色のロックアイコンをクリックします。コンテキストメニューで**ワークシートフィルタ:ロック**を選びます。これでフィルタ条件を保存することができます。



8. もとのワークシートで、**Power** 列にフィルタを追加します。フィルタアイコンをクリックしてより大きいを選択します。ダイアログで値を 100 に設定し、**OK** ボタンをクリックします。元のワークブックでは **Power** 列が 100 よりも大きい値しか表示しませんが、コピーしたワークシートではフィルタがロックされているため、更新はされなくなります。
9. 元のワークブックのフィルタ条件は変更されましたが、それをコピーしたときの条件に戻すには、**戻す**というオプションを使用します。操作としては、コピーしたワークシートで列 A のヘッダに表示された緑の鍵のアイコンをクリックし、**ワークシートフィルタ戻す**をコンテキストメニューから選びます。これで、コピーした時のフィルタ条件が元のデータに戻され、**Power** 列で設定した条件は反映されなくなります。



ロックフィルタオプションは新しいシートにのみ有効です。同じワークシートに列をコピーしても、鍵のアイコンをクリックして開くコンテキストメニュー内にこれらのオプションは表示されません。

4.5.2.ピボットテーブル

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 データベースからデータをインポートする](#)
- [4 ピボットテーブルを作成する](#)
- [5 小さな値をまとめる](#)
- [6 追加カテゴリソース](#)
- [7 分析テンプレートの作成](#)

サマリー

ピボットテーブルはデータ概要の把握や、分析、比較、データ間の関係確認を簡便に行えます。このツールは、ワークシートにある情報をソート、カウントしたり、合計、最小・最大・平均の計算もできます。

必要な Origin のバージョン:Origin 2015 SR0

学習する項目

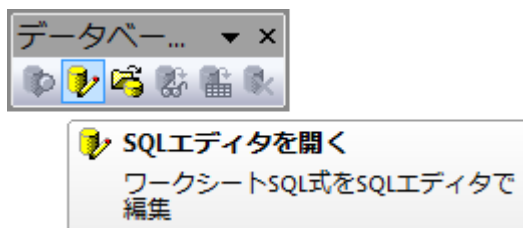
- ピボットテーブルでデータの概要を表示する
- ピボットテーブルで出力した列や行の合計を表示する
- 列や行の小さな値をまとめる等、カスタムする

データベースからデータをインポートする

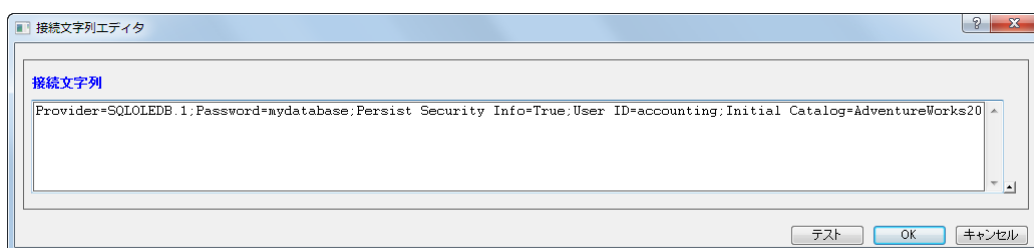
1. ピボットテーブルを作成する前に、データベースからデータをインポートする必要があります。ここでは、サーバマシン、*myServer* で SQL を実行している環境で *AdventureWorks2008R2* という名前のデータベースの設定を行ったとします。ユーザ名は「accounting」、パスワードは「mydatabase」であるとします。
2. データベースに接続するには、接続文字列を使用します。

```
Provider=SQLOLEDB.1;Password=mydatabase;Persist Security Info=True;
User ID=accounting;Initial Catalog=AdventureWorks2008R2;Data
Source=myServer
```

3. 空白のワークシートをアクティブにし、**データベースアクセスツールバーの SQL エディタを開く**ボタンをクリックして SQL エディタを起動します。



- SQL エディタの**ファイルメニュー**から**接続文字列を編集**を選択してダイアログを開きます。テキストボックスに上記の接続文字列を入力します。入力してから**テスト**ボタンをクリックして、接続を確認します。大丈夫なら **OK** をクリックしてデータベースにアクセスします。



- 右側のテキストボックスに、以下の SQL ステートメントを入力します。

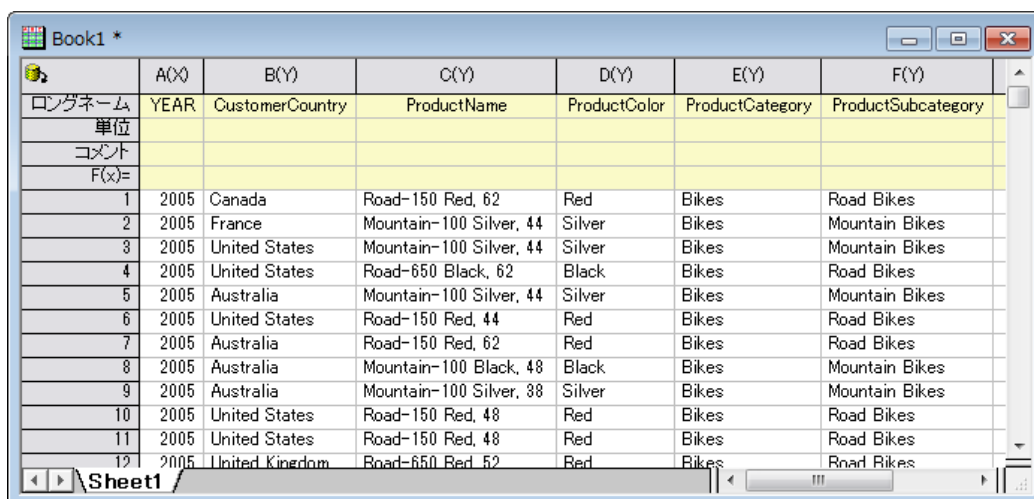
```

SELECT
DatePart (yyyy, SOH.OrderDate) AS YEAR,
CR.Name As CustomerCountry,
    Pr.Name As ProductName,
    Pr.Color As ProductColor,
    PC.Name As ProductCategory,
    PS.Name As ProductSubcategory,
    SOH.OrderDate As OrderDate,
    SOD.OrderQty As OrderAmount,
    SOD.LineTotal As TotalCost
FROM Person.CountryRegion AS CR
INNER JOIN Person.StateProvince AS SP
ON SP.CountryRegionCode = CR.CountryRegionCode
INNER JOIN Person.Address AS A
ON A.StateProvinceID = SP.StateProvinceID
INNER JOIN Person.BusinessEntityAddress AS BEA
ON BEA.AddressID = A.AddressID
INNER JOIN Person.Person AS P
ON P.BusinessEntityID = BEA.BusinessEntityID
INNER JOIN Sales.PersonCreditCard AS PCC
ON PCC.BusinessEntityID = P.BusinessEntityID
INNER JOIN Sales.SalesOrderHeader AS SOH
ON SOH.CreditCardID = PCC.CreditCardID
INNER JOIN Sales.SalesOrderDetail AS SOD
ON SOD.SalesOrderID = SOH.SalesOrderID
INNER JOIN Production.Product AS Pr
ON Pr.ProductID = SOD.ProductID
INNER JOIN Production.ProductSubcategory AS PS
ON PS.ProductSubcategoryID = Pr.ProductSubcategoryID

```

```
INNER JOIN Production.ProductCategory AS PC
ON PC.ProductCategoryID = PS.ProductCategoryID
--WHERE SOH.OrderDate BETWEEN '1/1/2005' AND '12/31/2008'
```

6. メインメニューの**ファイル:現在のワークシートに保存**を選択し、これらの設定をワークシートに保存します。次に**クエリー**を選択します。**インポート**を選択して、データをワークシートにインポートします。SQL エディタを閉じます。インポートデータを確認でき、以下のような画像が表示されます。





	A(X)	B(Y)	C(Y)	D(Y)	E(Y)	F(Y)
ロングネーム	YEAR	CustomerCountry	ProductName	ProductColor	ProductCategory	ProductSubcategory
単位						
コメント						
F(x)=						
1	2005	Canada	Road-150 Red, 62	Red	Bikes	Road Bikes
2	2005	France	Mountain-100 Silver, 44	Silver	Bikes	Mountain Bikes
3	2005	United States	Mountain-100 Silver, 44	Silver	Bikes	Mountain Bikes
4	2005	United States	Road-650 Black, 62	Black	Bikes	Road Bikes
5	2005	Australia	Mountain-100 Silver, 44	Silver	Bikes	Mountain Bikes
6	2005	United States	Road-150 Red, 44	Red	Bikes	Road Bikes
7	2005	Australia	Road-150 Red, 62	Red	Bikes	Road Bikes
8	2005	Australia	Mountain-100 Black, 48	Black	Bikes	Mountain Bikes
9	2005	Australia	Mountain-100 Silver, 38	Silver	Bikes	Mountain Bikes
10	2005	United States	Road-150 Red, 48	Red	Bikes	Road Bikes
11	2005	United States	Road-150 Red, 48	Red	Bikes	Road Bikes
12	2005	United Kingdom	Road-650 Red, 52	Red	Bikes	Road Bikes

7. **閉じる**をクリックしてダイアログを閉じます。

ピボットテーブルを作成する

インポートしたデータセットは、異なる6つの国々での、3つの製品カテゴリー(Bikes, Accessories, Clothing)の年毎の全体費用をまとめたものです。異なる製品カテゴリーの**全体コストの合計**を確認するために、ピボットテーブルを作成します。次のピボットテーブルを作成するステップに従ってください。

- Sheet1 をアクティブにし、メニューから**ワークシート:ピボットテーブル**を選択し、ダイアログを開きます。ダイアログ内で次の設定を行います。
 - ピボットテーブルの列ソースでは三角形ボタン  をクリックし、列 H を追加します。
 - ピボットテーブルの列ソースでは三角形ボタン  をクリックし、列 H を追加します。
 - サマリー出力タイプは**合計**を選択します。ピボットテーブルのデータソースに列 I を選択します。
 - オプションブランチを開き、**行合計の列追加と列合計の行追加**にチェックを付けます。そして、**合計列のソート**ドロップダウンリストから**行ラベルの昇順**を選びます。

再計算 手動

ピボットテーブルの行ソース [Book1]Sheet1!A"YEAR"

ピボットテーブルの列ソース [Book1]Sheet1!E"ProductCategory"

ピボットテーブルのデータソース [Book1]Sheet1!I"TotalCost"

サマリー出力タイプ 合計

日 より小さな値をまとめる

方向の統合 なし

日 オプション

行合計の列追加

合計列のソート 行ラベルの昇順

列合計の行追加

出力列のソート 列ラベルの昇順

列合計による正規化 なし

空の場合のゼロ表示

行ソースの追加値

列ソースの追加値

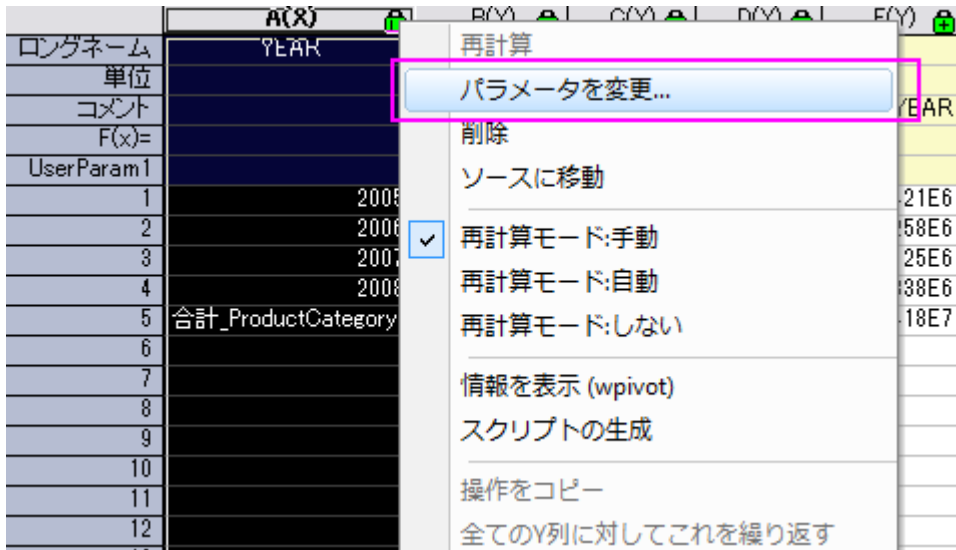
2. **OK** ボタンをクリックしてピボットテーブルを作成します。テーブルは次のようになります。

	A(X)	B(Y)	C(Y)	D(Y)	E(Y)
ロングネーム	YEAR	TotalCostの合計			
単位					
コメント		Accessories	Bikes	Clothing	合計_YEAR
F(x)=					
UserParam1					
1	2005	0	3.11421E6	0	3.11421E6
2	2006	0	6.26258E6	0	6.26258E6
3	2007	281089.1	8.96743E6	132728.69	9.38125E6
4	2008	391752.38	8.79936E6	192688.76	9.3838E6
5	合計_ProductCategory	672841.48	2.71436E7	325417.45	2.81418E7
6					
7					

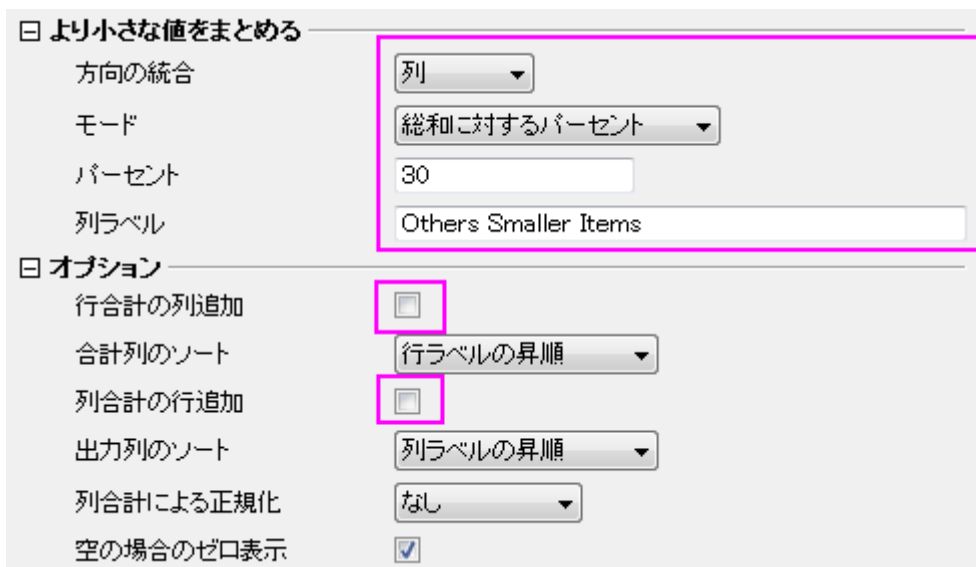
小さな値をまとめる

このセクションでは、列の合計の上位 3 列だけを表示する方法と、その他の列を 1 つの列にまとめる方法を示します。(Count/Sum/Mean/Min/Max)は、しきい値%を超えた総計を計算し、既存の他分類に小さな値の分類は統合されます。

- 上記の例題を踏まえて、**Pivot1** ワークシートの錠前アイコンをクリックし、**パラメータの変更**を選んで再びダイアログを開きます。



- ダイアログ内で次の設定を行います。
 - より小さな値をまとめるブランチを開き、方向の統合ドロップダウンリストから、列を選びます。
 - 総計の%をモードのドロップダウンリストから選択し、
 - %の欄に **30** を入力します。列ラベルのテキストボックスに、**Other Smaller Items** と入力します。
 - オプションブランチを開き、行合計の列追加と列合計の行追加にチェックを付けます。そして、合計列のソートドロップダウンリストから行ラベルの昇順を選びます。



- OK** ボタンをクリックします。ピボットテーブルは**カウント**によってまとめられたデータを表示します。*Bikes* のカテゴリのみ、総合計の%がしきい値の 30%を超えています。他の少ないカテゴリは減少して、**Other Smaller Items** の

カテゴリーに入れられます。

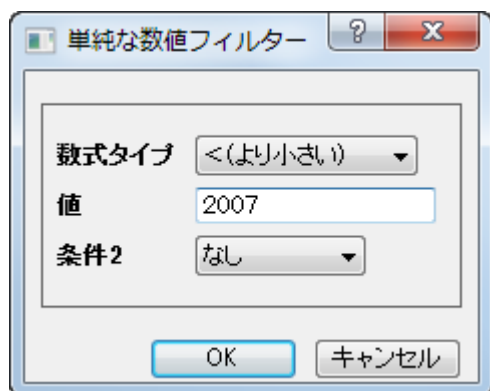
	A(X)	B(Y)	C(Y)
ロングネーム	YEAR	TotalCostの合計	
単位			
コメント		Bikes	Others Sm
F(x)=			
UserParam1			
1	2005	3.11421E6	0
2	2006	6.26258E6	0
3	2007	8.96743E6	413817.79
4	2008	8.79936E6	584441.14
5			
6			

追加カテゴリソース

このセクションでは、**Column Source Extra Value** でソースデータシートから無くなっている、いくつかのカテゴリーを表示する方法を説明します。これは、全ての必要なカテゴリーが結果ピボットテーブル内にあるか確認する時に便利です。

2007年より前の、異なる製品カテゴリーの全体コストの合計を確認したいとします。次のピボットテーブルを作成するステップに従ってください。

- 2007年より前の年を除外するため、データフィルタを使います。Sheet 1 に移動し、**列 A** を選択してメインメニューバーにある ボタンをクリックします。列 A にあるフィルタアイコンをクリックし、**より小さい** を選択します。単純な数値フィルタ ダイアログを次の通りに編集し、OK をクリックしてダイアログを閉じます。



- フィルタアイコンを再度クリックして、コンテキストメニューで**フィルタを有効する**を選択します。

3. **Pivot1** ワークシートのカギマークをクリックし、**再計算**を選択します。次のピボットテーブルが示すように、他の2つの製品カテゴリは2005年と2006年の費用データには記録されていないので、**Bikes**のみが存在しています。

	A(Y)	B(Y)	C(Y)
ロングネーム	YEAR	TotalCostの合計	
単位			
コメント		Bikes	Others Sm
F(x)=			
UserParam1			
1	2005	3.11421E6	0
2	2006	6.26258E6	0
3			
4			
5			

4. **Pivot1** のワークシートに戻り、**作図:棒グラフ/円グラフ:縦棒グラフ**を選択し、棒グラフ(*Graph1*)を作図します。
5. 次に、ピボットテーブルに2つの無くなったカテゴリを加えます。**Pivot1** ワークシートのカギマークをクリックし、**パラメータを変更**を選択します。次のようにダイアログを編集し、OKをクリックしてダイアログを閉じます。ピボットテーブルは次のようになります。

日 オプション

行合計の列追加

合計列のソート 行ラベルの昇順 ▼

列合計の行追加

出力列のソート 列ラベルの昇順 ▼

列合計による正規化 なし ▼

空の場合のゼロ表示

行ソースの追加値

列ソースの追加値 Accessories|Clothing

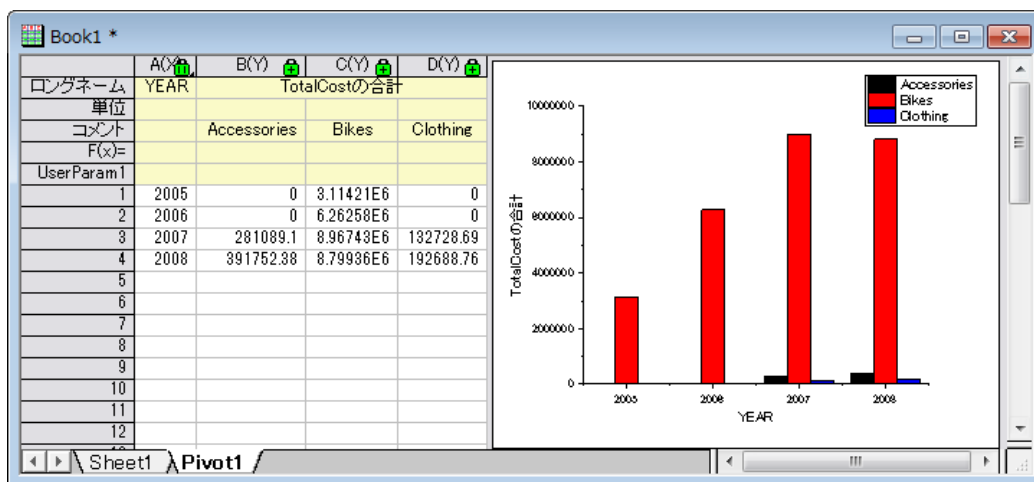
の値で分ける。例A|B|C
異なる列/行の情報を'|'で結合(例:A_1)|A_2

ピボットテーブルは次のようになります。

	A(Y)	B(Y)	C(Y)	D(Y)
ロングネーム	YEAR	TotalCostの合計		
単位				
コメント		Accessories	Bikes	Clothing
F(x)=				
UserParam1				
1	2005	0	3.11421E6	0
2	2006	0	6.26258E6	0
3				
4				

6. **Pivot1** のワークシートに再度戻り、棒グラフ(*Graph2*)を作図します。グラフでは無くなったカテゴリが表れています。

7. Pivot1 のワークシートに再度戻り、灰色の部分をクリックして、グラフの追加を選択し、Graph2 を Pivot1 のワークシートに追加します。




同様に年のフィルタもデータベースから取得されます。この場合、次のスクリプトを書き換えることで、好みの時間帯に編集することが出来ます。

```
--WHERE SOH.OrderDate BETWEEN '1/1/2005' AND '12/31/2008'
```

分析テンプレートの作成

このセクションでは、ピボットテーブル用の分析テンプレートの作成、データベースからの再インポートと新規のデータのためにピボットテーブルを作成する分析テンプレートの再利用について説明します。

- Book1 をアクティブにし、**ファイル:ワークシートをテンプレートとして保存**を選択し、Book1 を *SumTotalCost.ogw* と名前を付けて保存します。
- 新規の OPJ を開き、**ファイル:開く**から *SumTotalCost.ogw* を開きます。
- データソースを、データベースで *AdventureWorks2008* に変更します。
 - Sheet1 をアクティブにし、**SQL エディタを開く**ボタン  をクリックして、SQL エディタを開きます。
 - メインメニューから**ファイル:接続文字列を編集**を選択し、開いたダイアログに次の文字列を入力します。テストをクリックして、OK をクリックしデータベースに接続します。


```
Provider=SQLOLEDB.1;Password=mydatabase;Persist Security Info=True;
User ID=accounting;Initial Catalog=AdventureWorks2008;Data Source=myServer
```

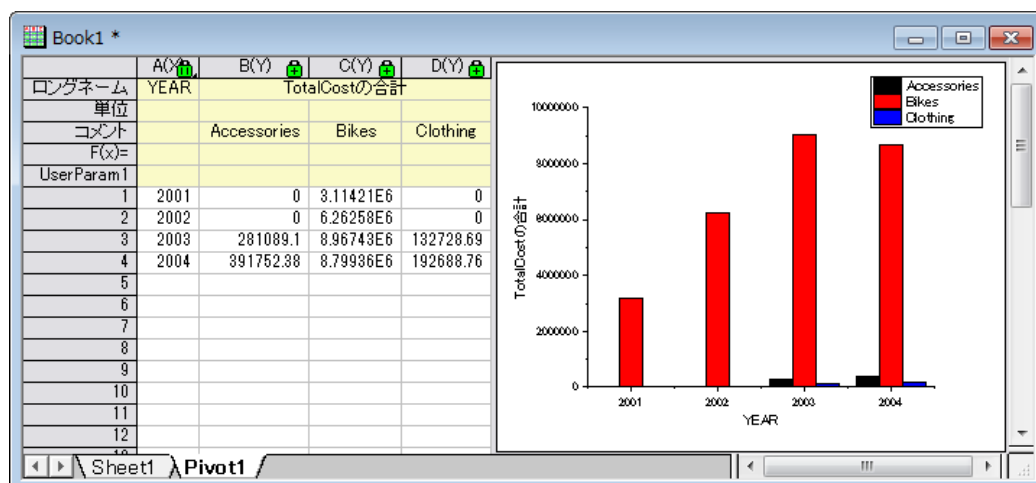
- SQL 編集のダイアログに戻り、右側のパネルで、以前のスクリプトを次のように書き直します。

```
--WHERE SOH.OrderDate BETWEEN '1/1/2001' AND '12/31/2004'
```

- **メニューのファイル:** 現在のワークシートに保存を選択し、これらの設定をワークシートに保存します。次に**クエリー:** インポートを選択してワークシートにデータをインポートし、SQL エディタを閉じます。次の画像で、インポートされたデータを確認出来ます。

	A(X)	B(Y)	C(Y)	D(Y)	E(Y)
ロングネーム	YEAR	CustomerCountry	ProductName	ProductColor	ProductC
単位					
コメント					
F(x)=					
フィルタ					
1	2001	Canada	Road-150 Red, 62	Red	Bikes
2	2001	France	Mountain-100 Silver, 44	Silver	Bikes
3	2001	United States	Mountain-100 Silver, 44	Silver	Bikes
4	2001	United States	Road-650 Black, 62	Black	Bikes
5	2001	Australia	Mountain-100 Silver, 44	Silver	Bikes
6	2001	United States	Road-150 Red, 44	Red	Bikes
7	2001	Australia	Road-150 Red, 62	Red	Bikes
8	2001	Australia	Mountain-100 Black, 48	Black	Bikes
9	2001	Australia	Mountain-100 Silver, 38	Silver	Bikes
10	2001	United States	Road-150 Red, 48	Red	Bikes

- ピボットテーブルを更新するために、*Pivot1* のシートに移動し、黄色のカギマークをクリックして**再計算**を選択します。を新規のデータに従って、ピボットテーブルが更新されます。
- 既存のグラフを更新するために、
 - 既存のグラフをダブルクリックし、フローティングチャートをポップアップさせます。
 - グラフを選択し、**再計算** ボタンをクリックして更新します。  フローティングチャートも同様に更新します。
 - フローティングチャート右上の矢印をクリックし、ワークシートにフローティングチャートを戻します。ワークシートは次のようになります。



4.5.3. カテゴリー値と共有

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 カテゴリー値の編集](#)
- [4 カテゴリー値の共有](#)

サマリー

カテゴリー値はカテゴリー情報を列に格納します。Origin では、手動で追加、削除、順序を変更するなど行うことができます。そして、その列に保存されているカテゴリー情報は分析の結果シートに適用されます。また、カテゴリーはテキストファイルに保存でき、列やワークシートをまたいで共有できます。

必要な Origin のバージョン: Origin 2015 SR0 以降


学習する項目

- カテゴリー値を変更する
- カテゴリーマップの順序を変更する
- カテゴリー値を共有する



カテゴリー値の編集

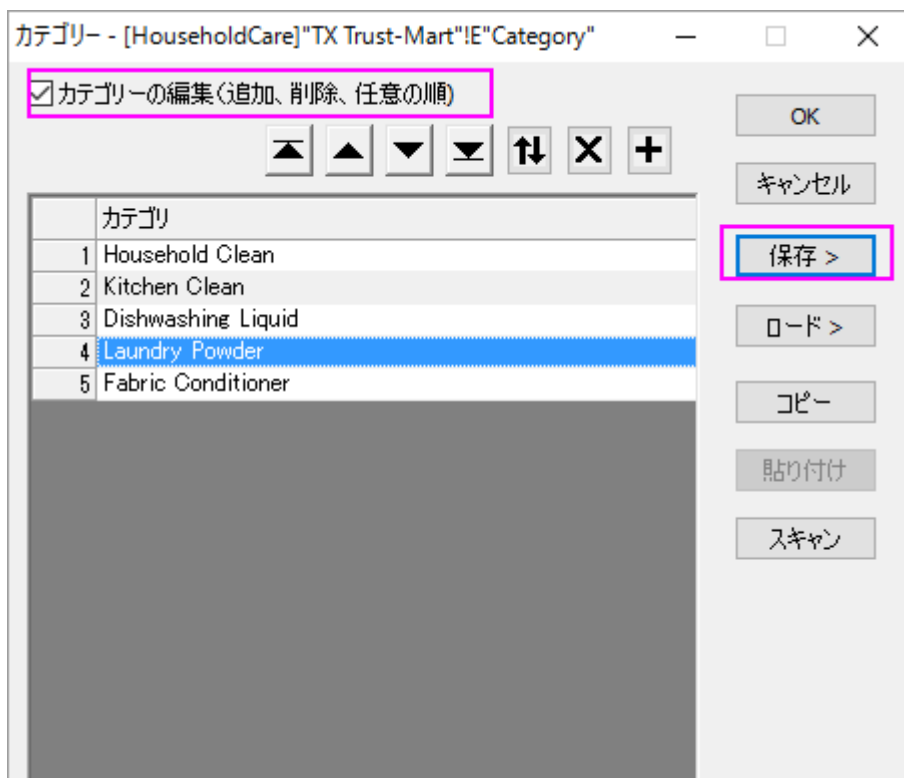
1. サンプルデータを開くには、Origin メニューでデータ:ファイルからインポート:Excel(XLS, XLSX, XLSM)... と選択します。<Origin プログラムフォルダ>\Samples\Statistics から HouseholdCareSamples.xls を選択します。ファイル

の追加ボタンをクリックします。オプションダイアログの表示チェックボックスにチェックが付いていることを確認します。OK ボタンをクリックして、impMSEExcel ダイアログを開きます。

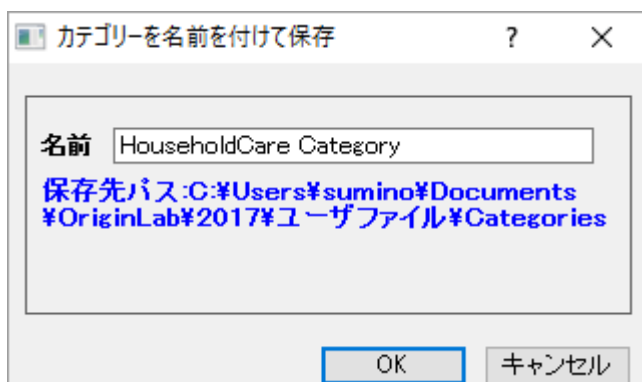
2. impMSEExcel ダイアログ内で次の設定を行います。
 - ファイル情報の下にある HouseholdCareSamples.xls を開きます。ファイルシートについているチェックを外し、HQ Family Mart と TX Trust-Mart のチェックをつけます。
 - ヘッダー行 のブランチにあるサブヘッダの行数ドロップダウンリストで 1、ロングネームドロップダウンリストで 1 を選択します。ヘッダを全てのシートに適用ボックスにチェックを入れます。
 - OK をクリックして、Origin にデータをインポートします。
3. HQ Family Mart ワークシートではロングネームが Category となっている列を選択して右クリックで表示するメニューからカテゴリーとして設定を選択します。カテゴリー行にあるソートなしをダブルクリックして、カテゴリーダイアログを開きます。
4. このリストの中から、残しておきたいのは Household Clean, Kitchen Clean, Dishwashing Liquid, Laundry Powder, Fabric Conditioner の 5 つだけで、このリストの順番に従って並び替えたいと思います。まず、カテゴリーの編集(追加、削除、任意の順)ボックスにチェックして、Ctrl キーを押しながら必要のない項目を一度に選択し、削除ボタン  をクリックすることで削除します。



5. 行の先頭をドラッグまたは、, ,  および  ボタンを使って、下のように並び替えます。

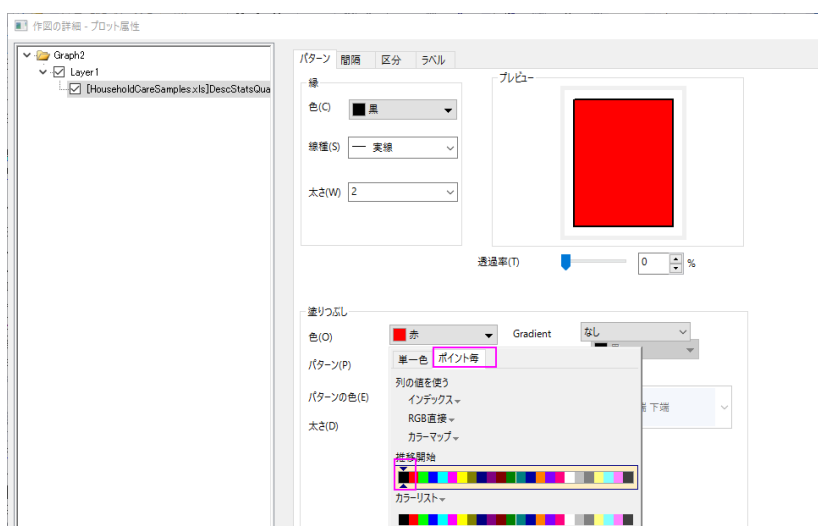


6. 並び替えをしてから**保存**ボタンをクリックして**名前を付けて保存**を選択し、**カテゴリ**を名前を付けて保存ダイアログを表示します。名前に「HouseholdCare Category」と入力し、OKをクリックしてカテゴリ値を**保存先パス**のフォルダにテキストファイルとして保存します。

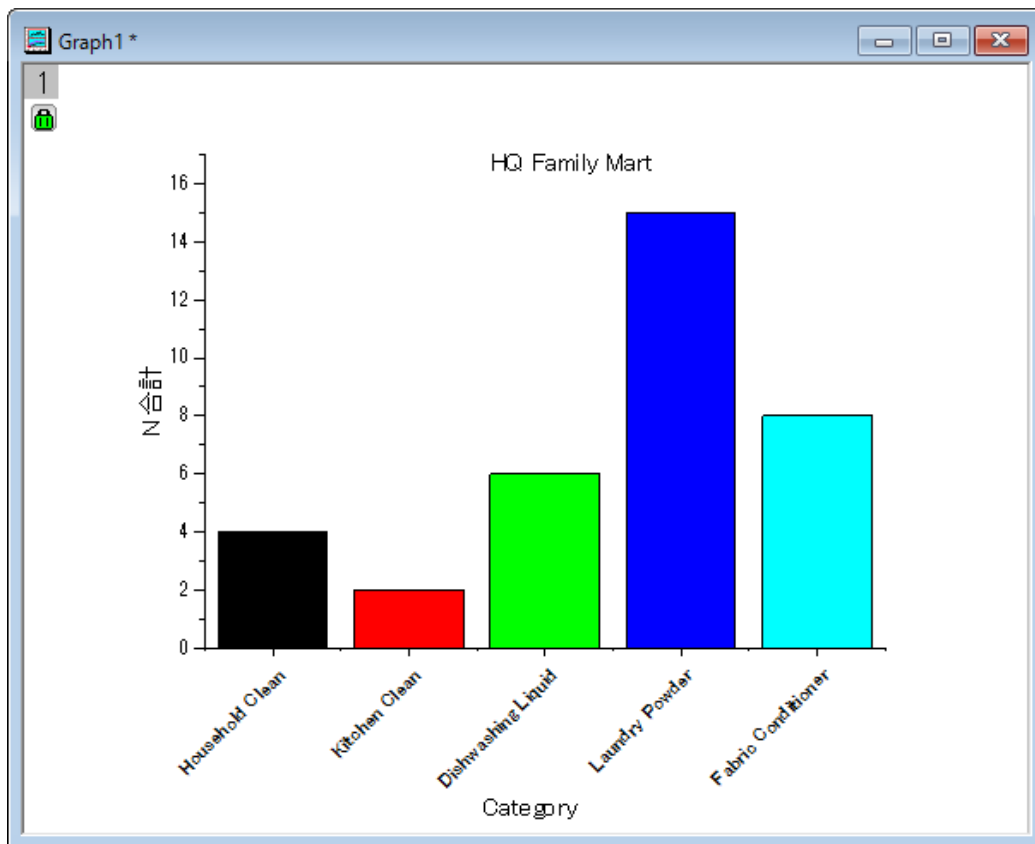


7. **OK** をクリックして、**カテゴリ**ダイアログを閉じます。
8. これからこれらの 5 つの**カテゴリ**にある合計の項目数を調べ、結果の列のプロットを作図します。ロングネーム「*Number*」の列を選択し、**統計: 記述統計: 列の統計**を選択して**列の統計**ダイアログを開きます。**グループ**の小さな右向きの三角形アイコンをクリックして **E(Y):Category** をグループ化する列として選択し、OKをクリックしてダイアログを閉じます。ポップアップするダイアログでも **OK** をクリックします。
9. *DescStatsQuantities1* シートに移動し、ロングネームが「*N 合計*」となっている列を選択してから**作図: 基本の 2D グラフ: 縦棒グラフ**を選択して縦棒グラフを作図します。

10. X 軸の目盛ラベルをダブルクリックすると軸ダイアログの目盛ラベルタブが開いているダイアログが表示されます。その中のフォーマットタブを選択し、回転(度)のドロップダウンに 45 を設定して OK をクリックします。
11. グラフをダブルクリックして作図の詳細ダイアログを開き、左パネルで Layer1 を開いて、最初の項目を選択します。パターンタブの塗りつぶしグループで、色のドロップダウンリストから色推移タブを選択して、開始色リストから色を黒に指定します。OK をクリックして、ダイアログを閉じます。



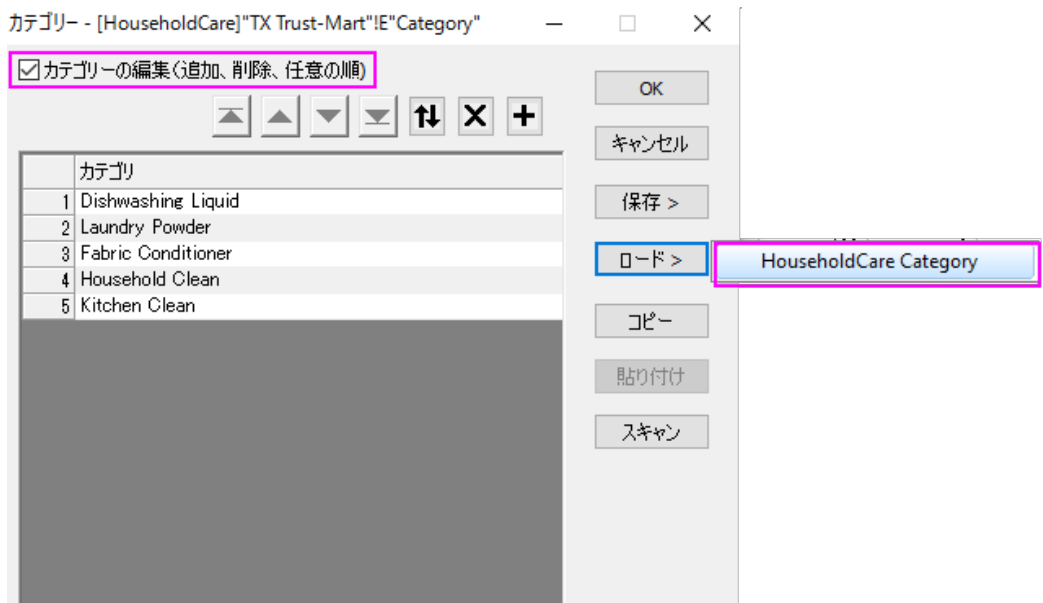
12. グラフページを右クリックし、ページをレイヤに合わせるを選択して、表示されるダイアログでそのまま OK をクリックします。これで、X 軸がページ内に表示されます。凡例を削除し、テキストツールを使って「HQ Family Mart」をグラフタイトルとして設定します。X 軸タイトルを移動し、グラフタイトルも見やすい位置に移動します。棒グラフは次のようになります。



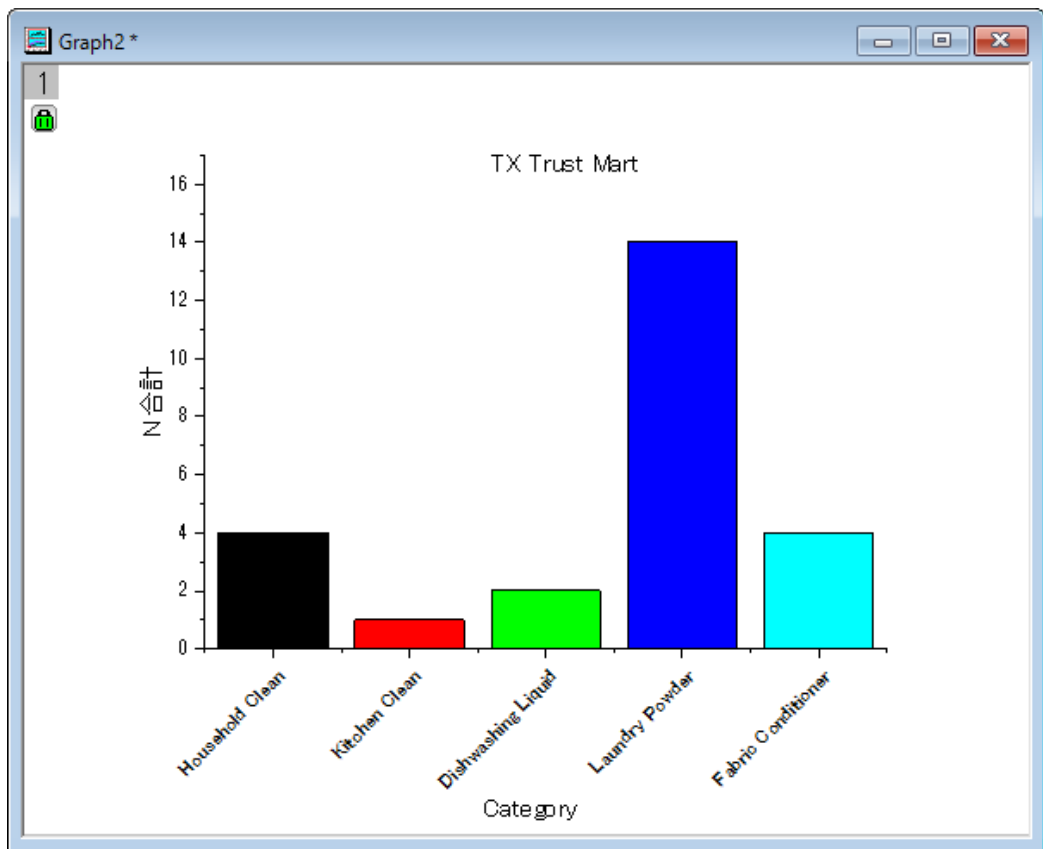
カテゴリ値の共有

1. 上記セクションから操作を続けます。先ほど保存したカテゴリを 2 枚目のワークシートである「TX Trust-Mart」に適用しましょう。TX Trust-Mart ワークシートをアクティブにし、ロングネームが *Category* となっている列を選択して右クリックで表示するメニューから **カテゴリ**として **設定**を選択します。
2. **カテゴリ**行にある **ソートなし**をダブルクリックして、**カテゴリ**ダイアログを表示します。**カテゴリ**の **編集**(追加、削除、任意の順)ボックスにチェックを入れて、右側にある **ロード**>ボタンをクリックして、表示される「HouseholdCare

Category」ファイルを選択します。



- 上記の 7 から 12 のステップと同じ操作を行います。ただし、ステップ 12 では「HQ Family Mart」ではなく「TX Trust-Mart」というテキストを入力しましょう。これで TX Trust Mart の元データから次のグラフが出来ます。



4.6. 分析テンプレート

4.6.1. 分析テンプレートの作成と利用

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ステップ](#)
 - [3.1 データをインポートする](#)
 - [3.2 分析を実行する](#)
 - [3.3 分析テンプレートとして保存する](#)
 - [3.4 分析テンプレートの再利用](#)

サマリー

繰り返しの作業は、分析テンプレートを作成することで単純化することができます。このようなテンプレートには、複数の分析結果やカスタムレポートシート含めることができます。テンプレートの新しいインスタンスをいつでも開くことができ、元データを変更すると、すべての分析結果とカスタムレポートが更新されます。

必要な Origin のバージョン: Origin 2015 SR0

学習する項目

- 分析テンプレート (OGW)の作成方法
- 新しいデータで分析テンプレートを再利用する方法

ステップ

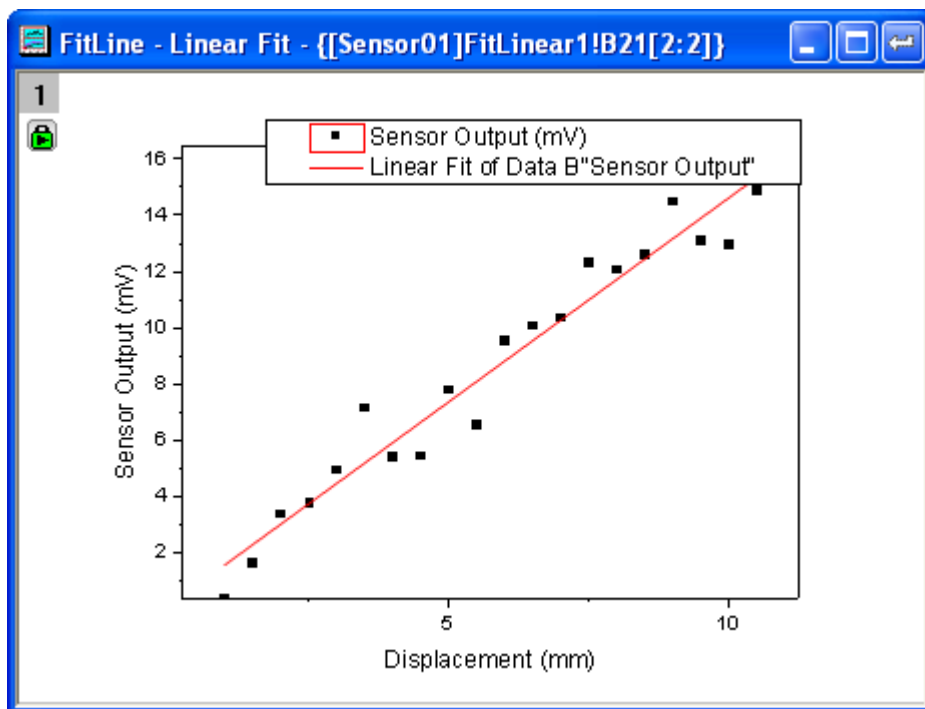
データのインポート

1. 新規ワークブックを開きます。
2. 標準ツールバーにある**単一 ASCII インポート**ボタン  をクリックして、ダイアログを開きます。<Origin EXE folder>\Samples\Curve Fitting\ フォルダにブラウズし、**Sensor01.dat** を選択します。**オプションダイアログの表示**チェックボックスにチェックを付け、**開く**をクリックします。これによりインポート時の設定を指定するダイアログが開きます。
3. **impASC** ダイアログで、**ワークシート/ブックの名前を付ける/変更する**の項目を開き、**シート名を(部分)ファイル名にする**のチェックを外します。
4. **ダイアログテーマ**の右にある三角形ボタンをクリックして表示されるメニューから**保存先<Sheet>**を選択します。これでインポートの設定がワークシートに保存されます。

5. **OK** ボタンをクリックすると、**Sheet1** にデータがインポートされます。
6. ワークシートタブを右クリックしてシート名 **Data** に変更します。

分析を実行する

1. 列 B を選択し、**解析:フィット:線形フィット**メニューを選択し、**線形フィット** ダイアログを開きます。
2. **再計算を自動**に変更し、他の設定はデフォルトのまま **OK** ボタンをクリックしてフィットを実行します。
3. ブックに、結果表やグラフの埋め込まれたレポートシートが追加されます。
4. **FitLinear1** シートを開き、**フィット曲線のプロット**の項目にあるグラフ上で、ダブルクリックしてグラフウィンドウを開きます。このグラフには、元データとフィットデータがプロットされています。
5. メニューから、**表示:表示様式:レイヤ枠**を選択してグラフフレームを表示します。
6. データプロットをダブルクリックして、**作図の詳細(プロット属性)**ダイアログボックスを開きます。左パネルで、**FitLine** の項目をクリックして**ページ属性**のページを開きます。凡例/タイトルタブを開き、**アクティブデータセットの標識**のチェックを外して **OK** ボタンをクリックします。
7. メインメニューから**フォーマット:軸スケール:Y 軸**を選択して**軸**ダイアログを開きます。**スケール**タブで**主目盛のタイプ**で**増分**が選択され、**値**に **5** が入力されていることを確認します。左側パネルで Shift または Ctrl キーを使用して、**水平**と**垂直**の両方のアイコンを選択し、X 軸と Y 軸の両方に対して**再スケール**の種類を**自動**に設定します。**適用**ボタンをクリックして設定を適用し、**OK** をクリックしてダイアログを閉じます。
8. 凡例を移動してページ内に配置します。最終的なグラフは下図のようになります。




9. グラフのタイトルバー右上にある、閉じるボタン をクリックして、グラフを結果シートに戻します。

分析テンプレートとして保存する

1. ワークブックをアクティブにして、ファイルメニューからワークシートを分析テンプレートとして保存をクリックします。
2. 目的の場所までブラウズし、ファイル名として **MySensorData** を付け、**保存ボタン**をクリックします。
3. これで分析テンプレート **MySensorData.OGW** が保存されます。このテンプレートは、今後同じような分析を行う際に再利用できます。

分析テンプレートの再利用

1. 新しいプロジェクトを開き、メニューから、**ファイル:最近使ったブック**を選択します。開いたメニューオプションで、先ほど保存した分析テンプレート **MySensorData.ogw** を選択します。
2. **Data** ワークシートをアクティブにし、**単一 ASCII インポートボタン**  をクリックします。<Origin EXE フォルダ>\Samples\Curve Fitting\ の **Sensor02.dat** ファイルにブラウズし、ファイルをインポートします。
Note: ローカルドライブで **Sensor02.dat** の保存されたディレクトリを開いて **Data** シートにドラッグアンドドロップしてもインポート可能です。
3. **再計算モード**を自動に設定したので、新しいデータに対し、線形フィットの処理が自動的に実行されます。
4. ワークシートを **FitLinear1** 開き、**フィット曲線のプロット**にあるグラフをダブルクリックしてグラフウィンドウを開き、更新された結果を表示します。



この分析テンプレートは、似通ったデータに対するバッチ処理を実行する際にも使用可能です。詳細はこちらのチュートリアルを確認して下さい。



4.6.2. 列値の設定を使って分析テンプレートを作成する

サマリー

このチュートリアルでは、列を追加し、**実行前の処理スクリプト**を設定して、別の列のデータが変わったら、スクリプトを実行します。この手法は、繰り返し行われる似たようなデータ分析を行うための**分析テンプレート**として利用することができます。

必要な Origin のバージョン:8.0 SR6

学習する項目

- 列値の設定を使って、分析テンプレートを作成する
- Go to 関数を使って行を選択する

ステップ

1. 下図のように、新しいワークブックに \\Samples\Statistics\automobile.dat データをインポートします。この例では、Make 列に応じてデータを別のワークシートに抽出します。

	A(X)	B(Y)	C(Y)	D(Y)	E(Y)
ロングネーム	Year	Make	Power	0~60 mph	Weight
単位			kw	sec	kg
コメント					
1	1992	Buick	132	14	2238
2	1992	Acura	154	12	2324
3	1992	GMC	158	13	1531
4	1992	Chrysler	132	10	2088
5	1992	Kia	121	12	1202
6	1992	Suzuki	106	10	1417
7	1992	Volvo	95	14	1661
8	1992	Mercedes	132	14	2208
9	1992	Acura	128	13	1412
10	1992	Isuzu	124	17	1518

2. 空の列をワークシートに追加し、その列の列値の設定ダイアログを開きます。実行前の処理スクリプトのボックスに以下のスクリプトを入力します。

```
// 離散度数カウントを実行するデータの範囲
range makeCol = !col(make);
// 抽出するワークシート
range sourceWks = !;

// ワークシートのクリア
int sheetNum = page.nlayers;
int colNum = wks.ncols - 1;
if (sheetNum>1)
{
    for (jj=2; jj<=sheetNum; jj++)
    {
        layer -d 2;
    }
}

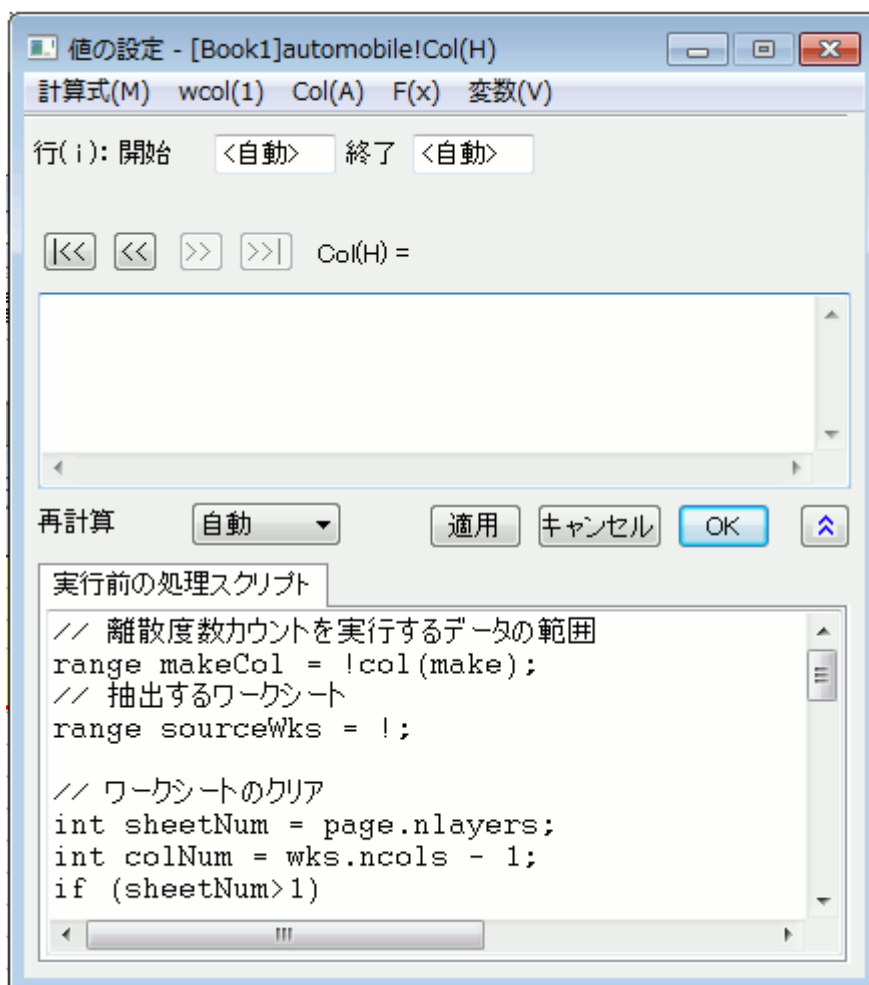
// discfreqs の出力を保持するツリー変数
tree tr;
// 離散度数カウントを実行
discfreqs irng:=makeCol rd:=tr;
// ツリーから結果を取得する文字列配列
StringArray sa;
sa.append(tr.FreqCount1.Data1);
```

```

if( sa.GetSize() != NANUM )
{
    // データ抽出のループ
    for (ii=1; ii<=sa.GetSize(); ii++)
    {
        string sn$ = sa.GetAt(ii)$;
        // 条件文字列を抽出
        string cond$ = "makeCol$ = " + sn$;
        // 異なる Make 名を持つワークシートの作成
        newsheet name:=sn$ cols:=colNum outname:=on$ active:=0;
        // データ抽出
        wxt test:=cond$ iw:=sourceWks c2:=colNum ow:=on$;
    }
}

```

このスクリプトは、まず Make 列に対して離散度数カウントを実行し、Make の明確な値を取得します。そして各ブランドに対する新しいワークシートを作成し、シートにデータを抽出します。



- 再計算モードが**自動**に設定されている事を確認して **OK** をクリックします。データは別々のワークシートに分けられます。緑の錠前アイコンがある空の列(H)は、この操作が自動的に更新されることを示しています。

	E(Y)	F(Y)	G(Y)	H(Y)
ロングネーム	Weight	Gas Mileage	Engine Displacement	
単位	kg	mpg	cc	
コメント				
1	2238	11	5736.5	
2	2324	11	5212	
3	1531	10	5900.4	
4	2088	12	6277.4	
5	1202	12	5736.5	
6	1417	14	5736.5	
7	1661	13	5031.7	
8	2208	12	5736.5	
9	1412	12	5736.5	
10	1518	13	5900.4	

4. 元のデータには 18 の自動車メーカーがあるので、18 個の新しいワークシートが作成されます。では、自動更新が機能するか確認しましょう。

Honda タブを開きます。19 行のデータが入力されている事が分かります。

5. 最初のシートを開きます。スクロールして、最後の行を削除します。

	A(X)	B(Y)	C(Y)	D(Y)	E(Y)	F(Y)	G(Y)	H(Y)
ロングネーム	Year	Make	Power	0*60 mph	Weight	Gas Milea	Engine Dis	
単位			kw	sec	kg	mpg	cc	
コメント								
スパークライン	[Line Graph]							
338	2004	Infiniti	38	12	867	35	1491.5	
339	2004	Isuzu	49	15	848	36	1589.8	
340	2004	Honda	32	11	867	35	1491.5	
341								
342								
343								
344								
345								
346								
347								

すると、自動更新が行われます。**Honda** タブを開きます。すると、18 行分のデータのみ確認できます。

	A(X)	B(Y)	H(Y)	I(Y)	J(Y)	K(Y)	L(Y)
ロングネーム	Year	Make	Power	0~60 mph	Weight	Gas Mileag	Engine Disp
単位			kw	sec	kg	mpe	cc
コメント							
スパークライン							
1	1992	Honda	147	18	2140	10	5031.7
2	1993	Honda	100	10	1292	15	4949.8
3	1993	Honda	110	15	1625	15	5212
4	1994	Honda	121	17	1146	16	5736.5
5	1995	Honda	124	12	1297	17	6556
6	1995	Honda	124	13	1251	17	5736.5
7	1996	Honda	62	17	1099	20	1999.6
8	1996	Honda	66	23	1627	20	3687.7
9	1997	Honda	64	16	1979	20	1589.8
10	1997	Honda	62	19	1250	21	3278



4.6.3. カスタムレポートシートの作成

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ステップ](#)
 - [3.1 データをインポートする](#)
 - [3.2 カスタムレポートシートの作成](#)
 - [3.3 分析テンプレートの保存](#)
 - [3.4 分析テンプレートの再利用](#)

サマリー

Origin のワークシートをカスタマイズして、セルを統合したり、グラフや画像のようなオブジェクトを配置したり、変数や他のシートのテーブル/セルへのリンクを埋め込んで、カスタムレポートを作成することができます

このチュートリアルでは、既存の分析テンプレートにカスタムレポートを追加する方法を説明しています。これにより、新しいデータをインポートすれば解析結果が更新されるので、カスタムレポートをエクスポートしたり印刷することができます。

Note:このチュートリアルでは、ファイルを Origin にドラッグ&ドロップする方法を学習します。この場合、Origin を管理者として起動しないでください。

必要な Origin のバージョン: Origin 9.0 SR0 以降


学習する項目

- カスタムレポートシートの作成方法
- 分析テンプレート(OGW)の一部としてカスタムレポートを保存して、新しいデータで再利用する方法

ステップ


Note: あらかじめ分析テンプレートの作成と利用というチュートリアルを行い、**MySensorData.OGW** を作成する必要があります。

データのインポート

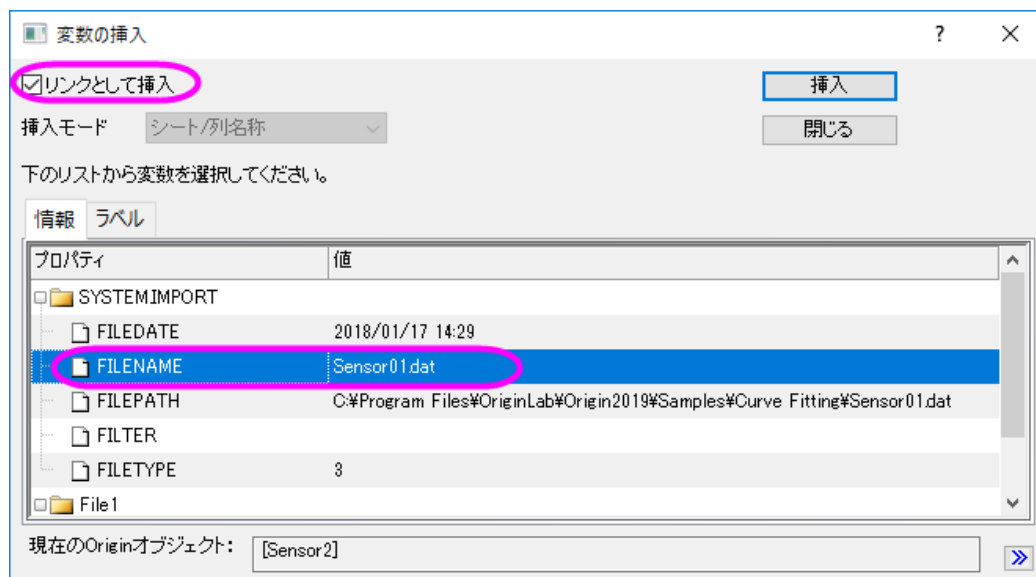
1. **ファイル:** 開くメニューからダイアログを開き、**ファイルの種類をワークブック(*.ogw)**として、分析テンプレート **MySensorData.OGW** を開きます。この分析テンプレートは、最初のシートの列 B に対して線形フィットの分析操作と、入力データとフィット曲線がから作図された埋め込みグラフとともに保存されています(テンプレートにはデータは含まれません)。
2. ワークシート **Data** をアクティブにし、**単一 ASCII インポートボタン**  をクリックして、**<Origin EXE フォルダ> \Samples\Curve Fitting** にブラウズし、**Sensor01.dat** をインポートします。

Note: ローカルドライブで **Sensor01.dat** の保存されたディレクトリを開いて **Data** シートにドラッグアンドドロップしてもインポート可能です。

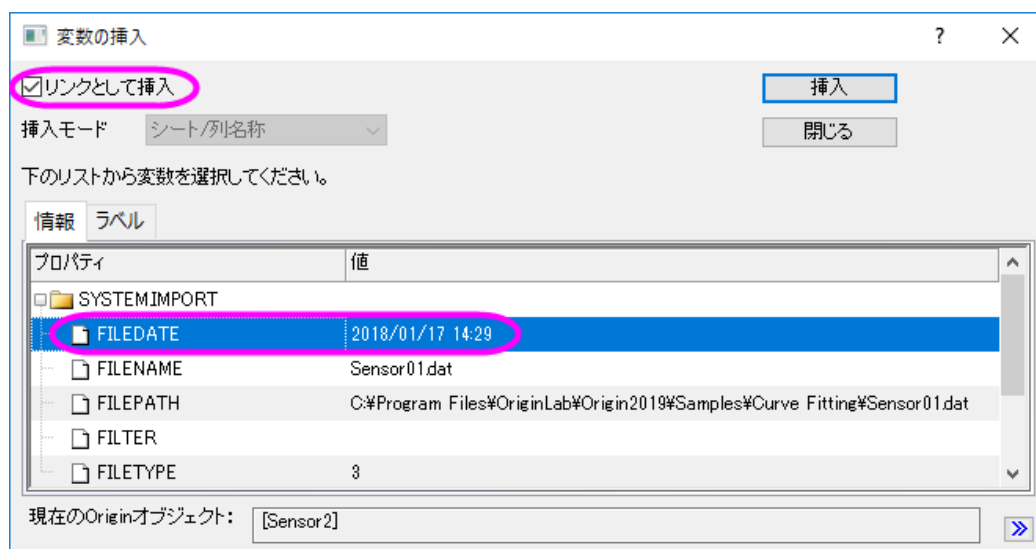
カスタムレポートシートの作成

1. ワークシート **Data** タブ上で右クリックし、**追加**を選択して、新しいワークシートを追加します。このワークシートを **Custom Report** という名前にします。
2. **Custom Report** シートをアクティブにし、**フォーマット:ワークシートの表示属性**(または **F4** キーを押す)を選択しダイアログを開きます。**サイズ**タブを開き、**サイズ**の項目の**行数を 20、列数を 9**に設定します。**その他**タブを開き、**行の自動追加**にチェックを付けます。**OK** ボタンをクリックしてこのダイアログを閉じます。
3. ワークシートで、**ロングネーム、単位、コメント、F(x)=**のヘッダ行でクリックしてドラッグして、これらの 4 つの行を選択します。右クリックして開くメニューから、**非表示**を選択します。これによりワークシートから、これら 4 行が隠されます。
4. 全ての列の最初の 3 行を選択して、スタイルツールバーにある**セルの統合ボタン**  をクリックします。統合したセルに、**Sensor Data Analysis Report** と入力します。
5. G、H 列の 5 行目から 6 行目についても同様に統合します。F 列の 5 行目に **File Name:**と入力し、6 行目には **File Date:**と入力します。

6. G, H 行を統合した 5 行目のセルで右クリックして、コンテキストメニューから**変数の挿入**を選択します。ダイアログが下図のようになっているのを確認して、**FILENAME** 変数を選択して挿入をクリックし、このセルに変数を挿入します。



7. G, H 行を統合した 6 行目のセルで右クリックして、コンテキストメニューから**変数の挿入**を選択します。ここでは、下図のように **FILEDATE** 変数を挿入します。



8. 日付データの入力されたセル上で右クリックして、コンテキストメニューから**セルのフォーマット**を選択します。**列のデータ型を日付**に変更して、**OK** ボタンをクリックします。
9. ワークシート **FitLinear1** を開き、**パラメータ表**を表示します。三角形のボタンをクリックして、**フライアウトメニュー**から**表のコピー**を選択します。
10. **Custom Report** シートを開き、E 列の 9 行目を選択します。そして右クリックして、**リンクの貼り付け**を選択します。E 列に入力された **Sensor Output** というテキストは、**Delete** キーを使用して削除します。

11. G, H 列の 13 行目と 14 行目を統合します。
12. FitLinear1 シートを開き、統計表でピアソンの r と補正 R 二乗の値を選択して右クリックしてコピーを選択します。
13. Custom Report シートを開き、統合した 13 行目を選択します。そして右クリックして、リンクの貼り付けを選択します。2 つの統合セルに値が貼り付けられます。これらのセルの一つ左に、ピアソンの r と、補正 R 二乗と入力します。
14. F, G, H 列の 8 行目、12 行目、20 行目をそれぞれ統合します。統合したそれぞれのセルに、Fit Parameters、Fit Statistics、Report Date: \$(@D, D1) と入力します。
15. このうち 20 行目のセルで、右クリックしてデータの書式を設定:リッチテキストを選択します。リッチテキストが有効になると、\$(@D,D1) には実際のシステム日付が表示されます。
16. CTRL キーを押しながら、数値データが入力されたセルをクリックして選択してから、右クリックしてセルのフォーマットを選択します。桁数指定法のドロップダウンリストから、少数桁数=を選択して桁数を 3 に設定します。最後に、OK ボタンをクリックします。
17. スタイルと書式ツールバーにあるボタンを使用して、下図のようにセルの境界線、フォントサイズやスタイル、色などを変更します。必要に応じて、手動で列幅などの調節を行います。

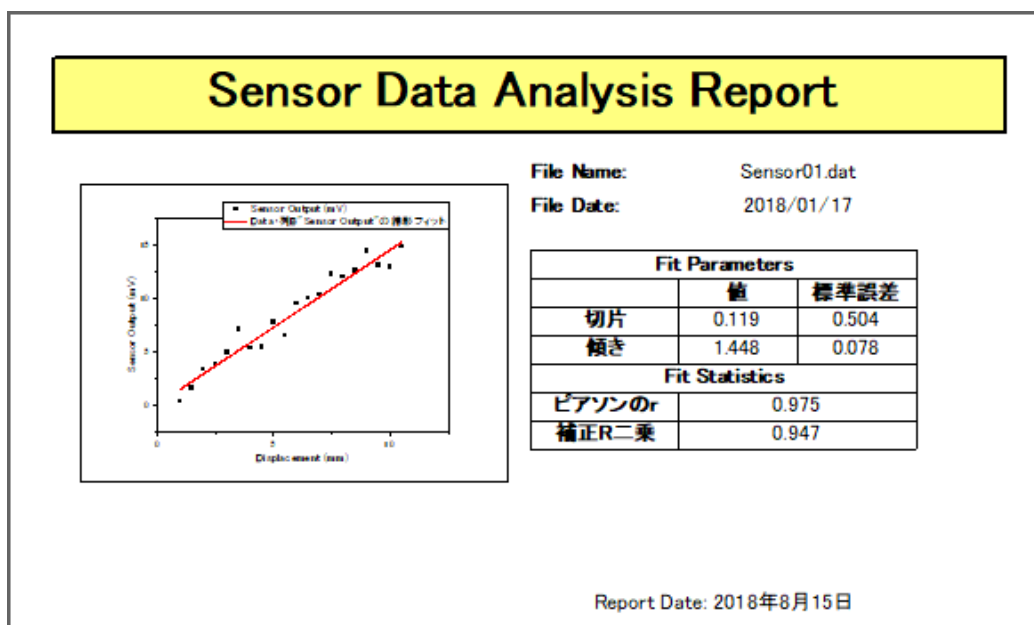
Sensor2 - Sensor01.dat *

	A(Y)	B(Y)	C(Y)	D(Y)	E(Y)	F(Y)	G(Y)	H(Y)	I(Y)
1	Sensor Data Analysis Report								
2									
3									
4									
5						File Name:	Sensor01.dat		
6						File Date:	2018/01/17		
7									
8						Fit Parameters			
9							値	標準誤差	
10						切片	0.119	0.504	
11						傾き	1.448	0.078	
12						Fit Statistics			
13						ピアソンのr	0.975		
14						補正R二乗	0.947		
15									
16									
17									
18									
19									
20									Report Date: 2018年8月15日

FitLinear1 / FitLinearCurve1 / Custom Report

18. FitLinear1 シートを開き、フィット曲線のプロットのグラフをダブルクリックして埋め込まれたグラフを開きます。グラフのタイトルバーで右クリックし、コンテキストメニューから、ウィンドウの複製作成を選択し、グラフを複製します (Graph1)。複製したグラフの軸をダブルクリックして、軸ダイアログボックスを開きます。X 軸と Y 軸(垂直と水平)、その両方でスケールタブにある再スケール項目を自動に変更します。それから埋め込みグラフを閉じます。

19. ワークシート **Custom Report** に戻り、ワークシート内の灰色の領域で右クリックして開くコンテキストメニューから、**グラフを追加**を選択します。開いた**グラフブラウザ**で、埋め込みグラフを複製して作成した **Graph1** を選択します。**OK** ボタンをクリックし、このグラフをフローティンググラフとしてワークシートに追加します。
20. このフローティンググラフは、クリックして表示されるアンカーポイントを使用して位置や大きさを変更できます。
21. **フォーマット**:ワークシートの表示属性を選ぶか、**F4** キーを押して、**ワークシートプロパティ**ダイアログを開きます。表示タブで、**グリッド線を表示**の項目を開き、**列グリッド**と**行グリッド**のチェックを外します。**フォーマット**タブを開き、**適用先をデータ**にし、**欠損値を空白として表示する**にチェックを付けて、「--」で表示されている欠損値が空欄になるようにします。**OK** ボタンをクリックして、ダイアログボックスを閉じます。
22. **ファイル**メニューの**印刷プレビュー**を選択してカスタムレポートをプレビューすると、下図のようになります。




Origin 2018b から、選択された範囲内のすべての統合されたセル(統合されたセルの非連続ブロックを含む)は、スタイルツールバーのセルの統合ボタンをクリックすると統合を解除できます。

分析テンプレートを保存する

1. ワークブックをアクティブにして、**ファイル**メニューからワークシートを**分析テンプレート**として**保存**をクリックします。
2. ファイルパスを指定して、ファイル名として **SensorDataReport** を付け、**保存**ボタンをクリックします。
3. 分析テンプレートとして保存された **SensorDataReport.OGW** は、似通ったデータに対して同じ分析を実行する際に使用可能です。

分析テンプレートの再利用

1. 新しいプロジェクトを開き、メニューから**ファイル:最近使ったブック**を選択します。先ほど保存した **SensorDataReport.OGW** を選択して開きます。
2. ワークシート **Data** をアクティブにし、**単一 ASCII インポートボタン**  をクリックして、<Origin EXE フォルダ>\Samples\Curve Fitting\ にブラウズし、**Sensor02.dat** をインポートします。

Note: ローカルドライブで **Sensor02.dat** の保存されたディレクトリを開いて **Data** シートにドラッグアンドドロップしてもインポート可能です。

3. 新しくインポートされたデータを使用した線形フィット結果や、カスタムレポートが出力されます。



4.7. 分析テーマ

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ステップ](#)
 - [3.1 テーマとして分析手順を保存](#)
 - [3.2 テーマで分析手順を繰り返す](#)

サマリー

Origin では、分析手順をテーマで制御することができます。テーマは、実際には分析ダイアログの設定を保存する XML ファイルです。たとえば、分析を実行した後、このダイアログには最近使用された設定を保存した<前回通り>テーマが表示されます。テーマに適切な名前を割り当てて将来それを使うことができます。

このチュートリアルでは、[列の統計]ダイアログを使用して、分析テーマの作成方法と使用方法を説明します。この分析は、平均、標準偏差、最小、最大などのデータに関する記述統計を提供します。視覚化のために、ヒストグラムまたはボックスチャートを分析結果シートに作成することもできます。

必要な Origin のバージョン: Origin 8.0 SR6 以降

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について解説します

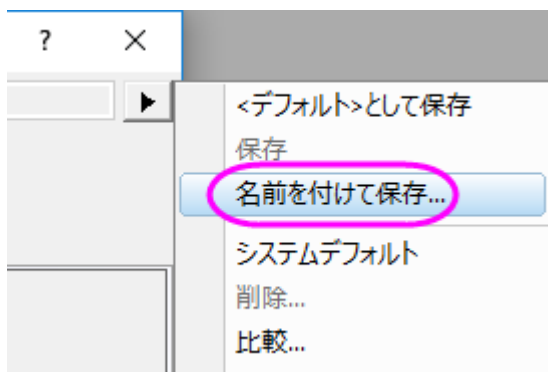
- 簡単な記述統計を実行します。

- 分析テーマの作成
- テーマを使用する。

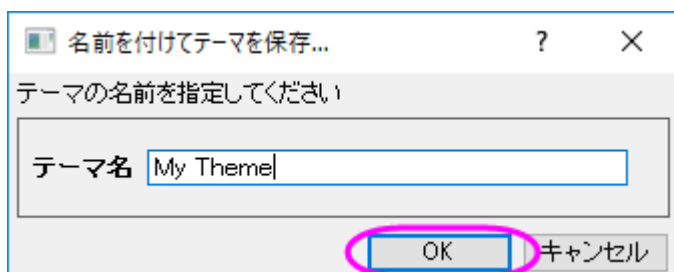
ステップ

テーマとして分析手順を保存

1. 新しいワークブックを開き、`\Samples\Statistics\automobile.dat` ファイルを開きます。
2. C 列を選択し、統計: 記述統計: 列の統計を選びダイアログを開きます。
3. 値タブを選択し、モーメントツリーノードを展開して、N 合計、平均、標準偏差、標準誤差と合計ボックスをオンにします。
4. プロットタブを開き、ヒストグラムとボックスチャートにチェックを付けます。対応するヒストグラムとボックスチャートのグラフを取得します。
5. この分析ダイアログで選択した内容はテーマとして保存できるので、手順を簡単に繰り返すことができます。ダイアログ右上にある矢印ボタンをクリックして名前を付けて保存を選択します。...



ダイアログボックスが開きます。



6. 「MyTheme」など適切なテーマ名を入力し、OK ボタンをクリックします。
7. 「列の統計」ダイアログで OK ボタンをクリックします。ワークシート DescStatsOnCols1 が作成され、結果レポートが出力されます。

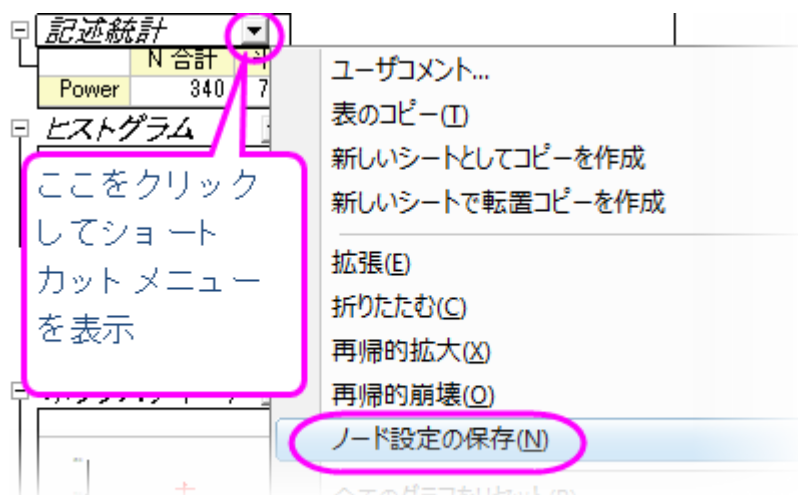
記述統計						
	N	合計	平均	標準偏差	標準誤差	合計
Power	340		79.85	28.07561	1.52261	27149



設定を変更したダイアログテーマをその解析ダイアログのデフォルトとして保存しておく、いつも同じ設定でダイアログを開き、解析に使用できます。実際の操作としては、ダイアログデータを保存する際に、<デフォルト>として**保存**を選択します。一度デフォルトテーマを保存した後に、元に戻す場合、メニューから**削除**を選択するとシステムデフォルトに戻すことができます。



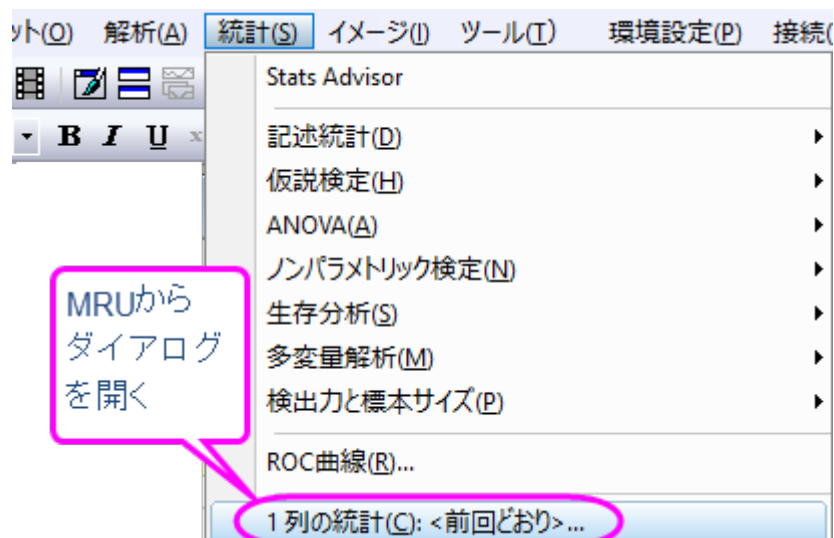
出力ノードを展開または折りたたんで、ショートカットメニューから**ノード設定を保存**を選択して、分析レポートシートの設定をテーマファイルに保存することもできます。詳細については、この表の**ノード構成を保存する**を参照してください。



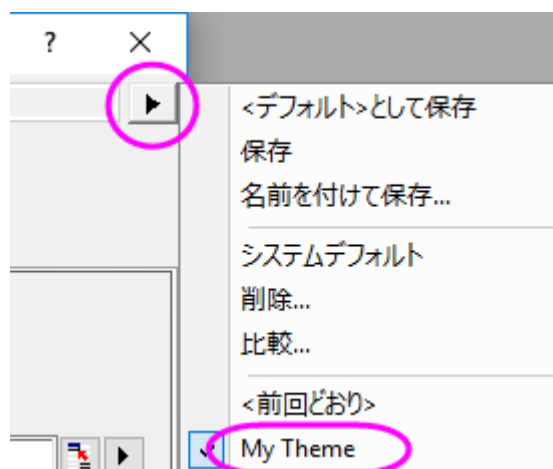
テーマで分析手順を繰り返す

テーマを保存すると、多くの方法でご利用頂けます。例えば、列 E を選択して、同じ設定で統計分析を実行できます。

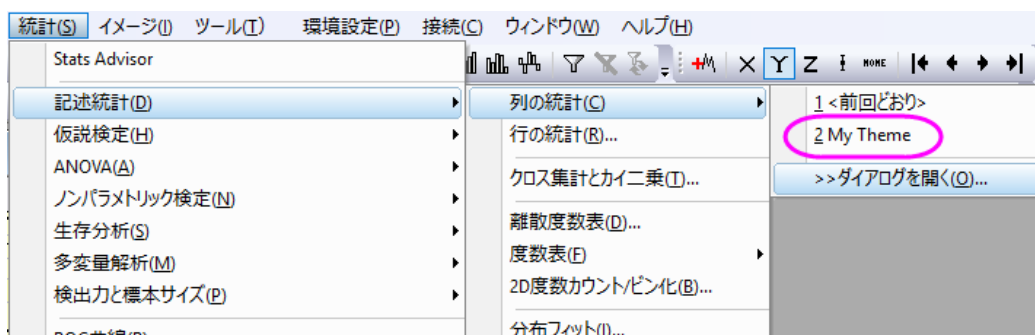
- 統計メニューの下部にある、**最近使った機能グループ**から**列の統計**を選択しダイアログを開きます。メニューにアクセスできるダイアログのほとんどは、MRU メニュー



から開くことができます。MRU からダイアログを開くと、デフォルトのテーマは<前回通り>です。**MyTheme** テーマを使うには、**ダイアログテーマ**ショートカットメニューから *MyTheme* を選択します。そのテーマの設定がダイアログに表示されます。**OK** ボタンをクリックして、分析を実行します。



- 分析テーマを適用する別の方法は、カスケードメニュー項目を使うことです。インストール後初めて分析ダイアログを使うか、ダイアログのテーマを保存すると、メニューレベルが1つ追加されます。ここから *MyTheme* メニューを選択します。



「ダイアログを開く...」メニューを選択すると、<デフォルト> テーマでダイアログボックスが開きます。テーマの設定を変更するには、**ダイアログテーマ**ショートカットリストからテーマを選択し、設定を変更して、テーマを再保存します。別の方法としては、分析を実行しないで保存したテーマを開きます。これには、**shift** キーを押しながらメニューからテーマを選択します。テーマが適用されたダイアログが表示されるので、必要に応じて変更を加えることができます。

4.8. バッチ処理

4.8.1. 複数データセットのバッチ処理

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ステップ](#)
 - [3.1 はじめにデータのフィットを行う](#)
 - [3.2 バッチ処理ツールを用いて複数データセットにフィットを行う](#)

サマリー

Origin は、分析テンプレートを使用し、複数ファイルやデータセットに対してバッチ処理を実行できます。このチュートリアルでは現在アクティブなワークブック/分析テンプレートを用いた複数データセットのバッチ処理をご紹介します。


学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- あるサンプルデータについて解析を行い、使用したい結果の結果シートを新たに作成します。
- 現在アクティブなワークブック(解析方法と再計算の設定を含む)を用いて複数データセットのバッチ処理を行います。

ステップ

データにフィットを実行する

1. 新しいワークブックを作成し、 のボタンをクリックします。<Origin EXE folder>\Samples\Curve Fitting\ フォルダを検索し、**Sensor01.dat** を選択して、分析用のデータをインポートします。
2. 列 B を選択し、**解析:フィット:線形フィット**メニューを選択し、**線形フィット** ダイアログを開きます。**再計算を自動**に設定します。**フィット制御**タブの **切片固定** にチェックを入れ、下の段の**切片固定** 欄に 0 を入力します。
3. 「OK」ボタンをクリックし、フィットを実行します。
4. **FitLinear1** のシートに移り、**概要**欄の下向き矢印をクリックして、**新しいシートとしてコピーを作成**を選択します。フィット結果について「概要」という新しいシートが作成されます。シート名を"Result"に変更し、col(A)を削除します。

バッチ処理ツールを用いて複数データセットにフィットを行う

1. ワークブックをアクティブにします。メニューから**ファイル:バッチ処理**を選択し、**バッチ処理**ダイアログを開きます。
2. **バッチ処理モード**の**アクティブ分析**テンプレートウィンドウ中に**繰り返しインポート**にチェックを入れます。
Note:分析テンプレートを保存し、**分析テンプレートをロード**オプションから利用することもできます。
3. **データソース**ドロップダウンから、**ファイルからインポート**を選択します。
4. **ファイルリスト**セクションの**ブラウズ**ボタンをクリックして、<Origin EXE フォルダ>\Samples\Curve Fitting フォルダから **Sensor01.dat**, **Sensor02.dat** and **Sensor03.dat** を選択します。
5. **データセット識別子**として、**ファイル名**を選択します。
6. **データシート**ドロップダウンリストで、**Sensor01** が選択されていることを確認します。

7. 結果シートドロップダウンリストで、**Result** を選択します。

バッチ処理(H): batchProcess

ダイアログ・テーマ *

分析テンプレートを使ってバッチ処理をし、サマリーテーブルを作ります

バッチ処理モード

アクティブ分析テンプレートウィンドウ中に繰り返しインポート
 分析テンプレートを読み

データソース ファイルからインポート

ワークブックのインポート設定を利用

ファイルリスト
 C:\Program Files\OriginLab\Origin2018b\Samples
 C:\Program Files\OriginLab\Origin2018b\Samples

データセット識別子 ファイル名

データシート Sensor01

結果シート Result

結果シートの内容は以下に示す別のブックの出力シートに追加されます。

出力シート Summary]Results<新規 template:=BatchResult>

オプション

出力シートの開始行 1

開始時に出力シートをクリア

ラベル行の追加

Excelシートに出力する場合、本チェックボックスをオンにして結果シートからラベルを追加してください

追加モード 行
 列

スクリプト

OK キャンセル

8. **OK** をクリックします。全てのセンサのデータが分析され、"Summary" というワークブックが作成されます。これは元の **Result** ワークシートの解析結果の概要に基づいています。

	A(Y)	B(Y)	C(yEr±)	D(Y)	E(yEr±)	F(Y)
ロングネーム	データセットID	切片	切片	傾き	傾き	統計
パラメータ	値	標準誤差	標準誤差	値	標準誤差	補正R二乗
1	Sensor01.dat	0	--	1.46454	0.03425	0.98917
2	Sensor02.dat	0	--	2.50729	0.0282	0.99748
3	Sensor03.dat	0	--	4.50124	0.03048	0.99908
4						
5						

4.8.2. 分析テンプレートを使用した複数ファイルのバッチ処理

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ステップ](#)
 - [3.1 バッチ処理を正しく出力する結果サマリーシートを含む分析テンプレートの準備](#)
 - [3.2 複数データファイルに対しバッチ処理を実行する](#)

サマリー

Origin は、複数のファイルをインポートするか、既存のデータセットを読み込んで、以前に作成した分析テンプレートを使用してバッチ解析を実行できます。

このチュートリアルでは、前者のバッチ解析の場合を取り上げます。一般的な(ASCII)ファイル構造を持つ複数のファイルをインポートした後、読み込まれた各データファイルに直線カーブフィッティングの解析テンプレートを繰り返し適用します。

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- バッチ処理の出力を収集するために結果集計シートを含む分析テンプレートを作成します。
- 分析テンプレートを使用した複数ファイルのバッチ処理

ステップ

一般に、バッチ処理の手順は 2 つの部分に分かれています。


1. ワークブックの空のフレームワークである分析テンプレートを作成して準備します。このワークブックテンプレートには、バッチ処理中の解析結果(例:線形カーブフィッティング)を収集するための結果集計シートが含まれています。
2. 複数のデータファイルに対して用意された分析テンプレートを使用してバッチ処理を実行します。

バッチ処理の出力を収集するために結果集計シートを含む分析テンプレートを作成します。


バッチ処理を実行する前に、分析ワークブック内のバッチ処理の出力を収集するために結果ワークシート(このチュートリアルのワークシート・セルにグラフを含めることがある)を含む分析テンプレートを作成する必要があります。

Note1: Origin のメニューヘルプ:フォルダを開く:プログラムフォルダ を選択して、<Origin EXE Folder> の場所を見つけます。同様に <User Files Folder> も、ヘルプ:フォルダを開く:ユーザファイルフォルダメニューから選択できます。

Note2: 分析テンプレートを作成するこの準備ステップをスキップしたい場合は、すぐに使用できる分析テンプレートをご利用ください。<Origin EXE Folder>\Samples\Batch Processing\MySensorData.OGWU (Origin 2017 以前のバージョンは OGW)を利用できます。また、バッチ処理に関係なく分析テンプレートを作成したい場合には、次のチュートリアル分析テンプレートを作成して使用する を参照してください。


1. データファイルをモデルとしてインポートしましょう新しいワークブックで、データ:ファイルからインポート:単一 ASCII のファイル メニュー(または、 ボタンをクリック)を選択し、ASCII ダイアログボックスで<Origin EXE folder>

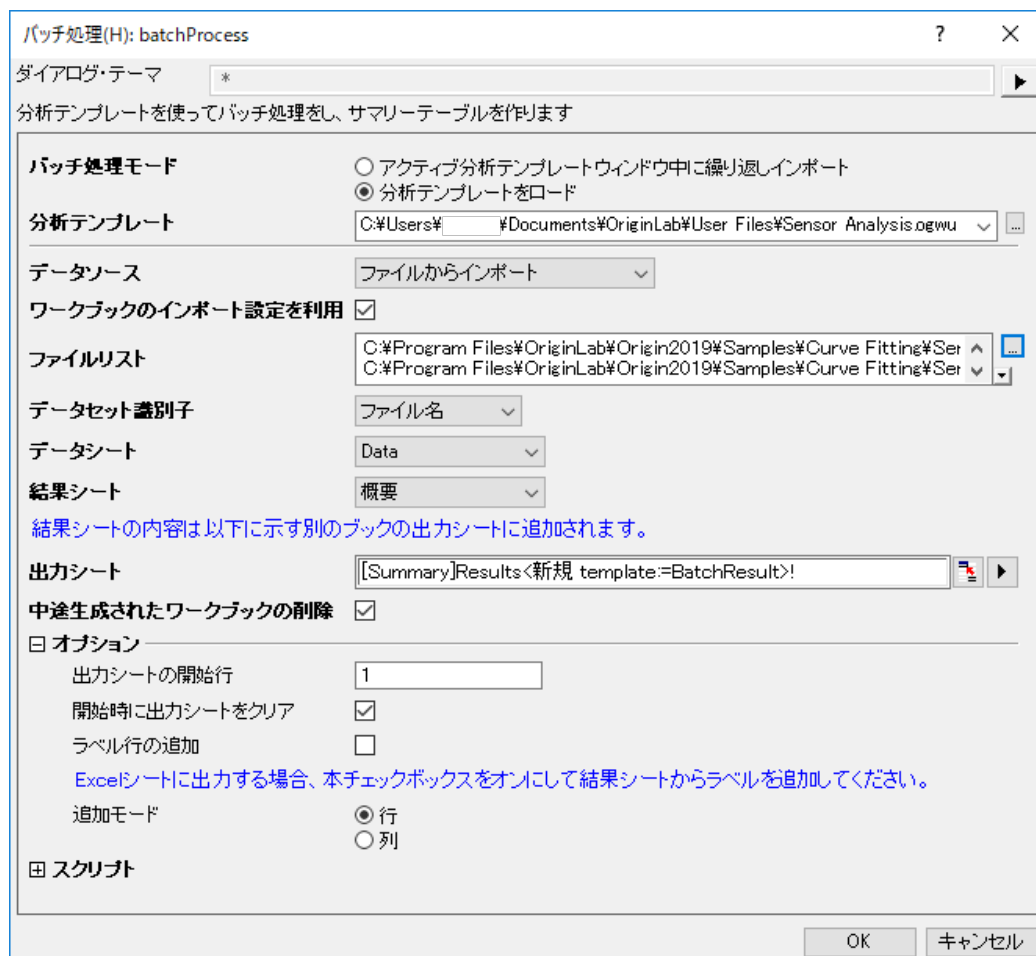
「Samples\Curve Fitting\Sensor01.dat」ファイルに移動し、**オプションダイアログを表示**にチェックを入れます。**OK** をクリックしてください。**impASC** ダイアログが開くので、**impASC** ダイアログの設定を行います。**シートとブックの名前の変更**の項目にある**シート名を(部分)ファイル名に変更する**のチェックを外します。このオプションをクリアすると、インポートされたデータは常に同じデータシート名になります(この場合は「Data」シート)。**ダイアログテーマ**の右にある三角形ボタンをクリックして表示されるメニューから**シート>に保存**を選択します。このフライアウトを選択すると、Origin はインポート設定をワークシートに保存し、Origin は常に同じ方法でファイルをインポートします。**OK** ボタンをクリックすると、データファイルがワークシートにインポートされます。**Sheet1** シートタブをダブルクリックし、より意味のある名前、「Data」に名前を変更します。

2. それでは、**サンプル実行として線形フィットを実行**しましょう。列 B をハイライト選択し、**解析:フィット:線形フィット:ダイアログを開く**を選択します。**線形フィット**ダイアログボックスが開きます。ダイアログで、**再計算を自動**に設定します(手動操作なしでバッチ処理を自動化するため)。**OK** をクリックして線形フィットを実行します。ワークブックで、**FitLinear1** 分析レポートに移動します。(メッセージボックスが表示されるので、はいで進みます。)
3. 次に、**バッチ処理の出力の収集場所として、結果集計表をこのワークブックに追加**します。ワークシート **FitLinear1** を開き、**概要表**を表示します。この表には、傾きや切片などの重要な分析結果が含まれており、結果サマリーシートの作成を開始するのに適しています。これを行うには、表名の横にある三角形のボタンをクリックして、**新しいシートとしてコピーを作成**を選択します。**概要**という名前で新しいシートが表から作成されます。
4. では、次にこの新しい**概要シートをデザインシカスタマイズ**してみましょう。ピアソンの r の統計とフィットしたカーブグラフが含まれるようにします。最初に、2つの新しい列(列 G と H)を追加するには、 ボタンを 2 回クリックします。ピアソンの r を列 G に追加しましょう。最初に **FitLinear1** シートに戻り、**統計**の表にあるピアソンの r 値のセルを右クリックし、**コピー**を選択します。次に、**概要**シートに移動し、G 列の最初のデータセルを右クリックし、**リンクの貼り付け**を選択して r 値のリンクを貼り付けます。この統計情報のキャプションについては、**FitLinear1** シート、**統計**の表のキャプションテキスト**ピアソンの r**をクリックし、右クリックして**コピー**を選択します。**概要**シートに戻り、G 列の**パラメータ**行を右クリックして**リンクの貼り付け**を選択します。
5. 同様の手順で、列 H に**フィットカーブのプロットを追加**しましょう。最初に、**FitLinear1** シートに移動し、**フィット曲線のプロット**にあるフィット結果の上で右クリックし、開いたメニューから **コピー** を選択します。次に、**概要**シートに移動し、H 列の最初のデータセルを右クリックして、**リンクの貼り付け**を選択して**グラフ**をリンクとして貼り付けます。H 列のロングネームを **Fitted Curve** と入力します。
6. **バッチ処理に利用する分析テンプレートを保存**しましょう。メニューの **ファイル:ワークブックを分析テンプレートとして保存** を選択します。保存場所は **<User Files Folder>** とし、テンプレート名を **Sensor Analysis** とします。**OK** をクリックします。Analysis テンプレートを既に保存しているため、Origin を閉じることができます。練習記録として保存しない限り、このプロジェクトを保存する必要はありません。

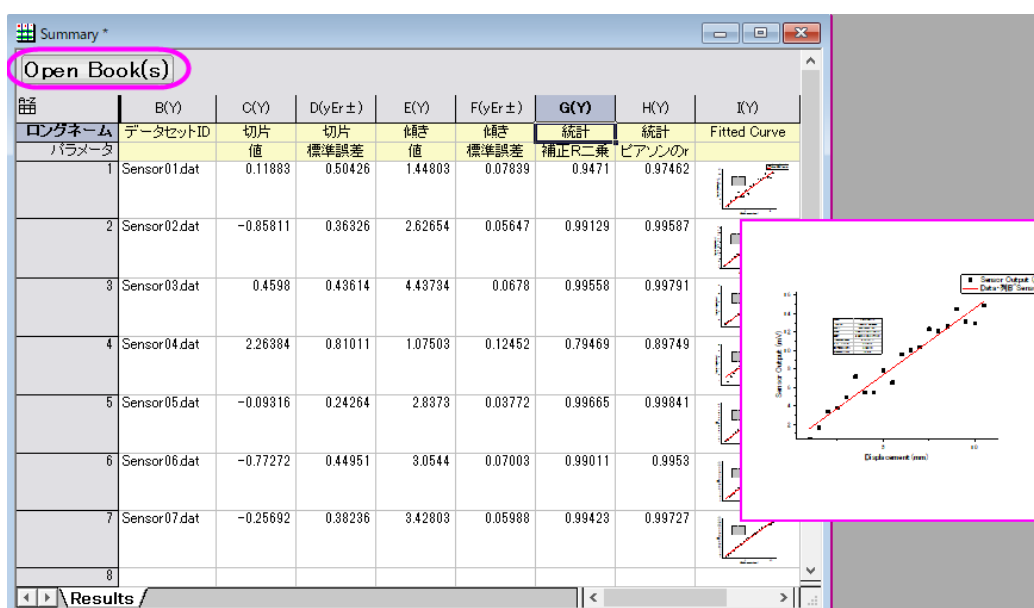
複数データファイルに対しバッチ処理を実行する

結果サマリーシートを含む分析テンプレートを作成したら、バッチ処理を実行して、多くのソースデータファイルから集計された出力を簡単に取得することが出来ます。

1. 新しいプロジェクトを開き、メニューの**ファイル:バッチ処理...** (または、 ボタンをクリック) を選択します。**バッチ処理** のダイアログが開きます。
2. **バッチ処理モードで分析テンプレートをロード** を選択すると、準備した分析テンプレートを使うことが出来るようになります。
3. **分析テンプレート**で、**Sensor Analysis.OGWU** (古いバージョンでは**.OGW**) ファイルを<**User Files Folder**> から選択して設定します。(… ボタンをクリックして、分析テンプレートの場所を指定することができます。)同様に、**データソース**では、**ファイルからインポート**をドロップダウンリストから選択します。
4. **ファイルリスト**では、… ボタンをクリックして、<**Origin EXE Folder**>**Samples\Curve Fitting**にある、全ての元データ **Sensor##.dat** (**##** はファイルの番号)を (複数の場合は SHIFT キーまたは CTRL キーを使って) 選択します。
5. **データセット識別子** では、結果サマリーシートに全てのソースデータの名称が表れるように、**ファイル名** に設定します。
6. **データシートドロップダウン**で、**Data** を選択して、結果の概要シートにインポートする受信ワークシートを指定します。同様に、**結果シート**のドロップダウンで、**概要**を選択して結果集計シートの出力先を指定します。
7. **中途生成されたワークブックの削除**チェックボックスは、多数の中間ワークブック/ワークシートを作成しないようにチェックする事が出来、または結果サマリーシートに加えてすべての中間出力を保存するためにチェックを外すことができます。(Note:Origin 2018 では、このチェックボックスをオンにしても、結果のサマリーシートの**ブックを開く**ボタンを使用すると、後でレポート全体を再生成できるため、中間レポートが失われる心配はありません。)



8. **OK** をクリックしてください。7 つのデータファイルはすべて、進行状況バーに示されているように処理されます。分析テンプレート内の 7 つの結果シートから集計された分析結果を含む **Summary** ワークブックが生成されます。任意のグラフセルにマウスポインタを合わせると、フィットグラフがポップアップして詳細を表示します。Origin 2018 以降では、個々のグラフの分析レポート全体を抽出する場合、目的の行を強調表示し、**Open Book(s)** ボタンを押します。



4.8.3. 外部 Excel ファイルのサマリーレポートを出力するバッチ処理

サマリー


このチュートリアルはサンプルプロジェクトと関連しています。\\Samples\Batch Processing\Batch Processing with Summary Report in External Excel File.OPJ

必要な Origin のバージョン: Origin: 8.1 SR2

学習する項目

- 複数データファイルのバッチ処理の実行
- 結果を外部 Excel ファイルに送り、そのファイルを保存する

ステップ

1. ワークブック'Book1'のワークシート'Raw Data'をアクティブにします。
2. メニューから**ファイル: バッチ処理**を選択するか、標準ツールバーの**バッチ処理** ボタン  をクリックします。
3. アクティブ分析テンプレートウィンドウ中に**繰り返しインポート**ラジオボタンを選択します。
4. データソースは、**ファイルからインポート**に設定します。
5. ワークブックの**インポート設定**を利用チェックボックスにチェックします。
6. ファイルリストの隣にある**参照ボタン(...)**をクリックします。
7. ファイルの種類で、**全てのファイル (*.*)**を選び、Origin の \\Samples\Batch Processing フォルダに移動します。

8. フォルダ内の 10 個すべての csv ファイルを選択し、**ファイルの追加ボタン**をクリックし、**OK**をクリックします。
9. **データシート**を 'Raw Data'にセットします。Note:素データは分析テンプレートの最初のシートにあり、このテンプレートがすでに使用され再保存されている場合、デフォルトで最後にインポートされたファイル名に変更されます。
10. **結果シート**は、'My Results'にセットします。
11. 出力シート編集ボックスの右にあるボタンをクリックします。これによりダイアログが最小化します。そして、Excel ブック(Book2)のタイトルバーをクリックし、最小化したダイアログの右にあるボタンをクリックすると再びダイアログが大きくなります。
12. オプションブランチを開き、**開始時に出力シートをクリア**チェックボックスにチェックを付け、**追加の開始行番号**に 7 を入力します。
13. **ラベル行の追加**チェックボックスにチェックを付けます。
14. OK をクリックします。



4.8.4. レポート用 Word テンプレートでのバッチ処理

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ステップ](#)
 - [3.1 分析テンプレートにブックマークを追加](#)
 - [3.2 Word テンプレートに分析結果をリンク](#)
 - [3.3 一度計算した結果をワードテンプレートに送り、ワードのレポートを作成](#)
 - [3.4 バッチ処理及び Word と PDF ファイルに結果を出力](#)

サマリー

Origin は複数ファイルのバッチ分析を実行することが出来、外部のレポート用 Word テンプレートにセルをリンクさせて分析結果を出力することが出来ます。

必要な Origin のバージョン:Origin 2016 SR0

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について解説します。

- Word テンプレートからのブックマークを分析テンプレートに追加する
- Word テンプレートのブックマークされたセルに分析結果をリンクさせ、出力するグラフのサイズを調整する

- 一度計算した結果をレポートのため、ワードテンプレートに送る
- 複数ファイルのバッチ分析を行い、Word または PDF ファイルに結果を出力する

ステップ



このチュートリアルでは、<Origin EXE folder>\Samples\Batch Processing\ フォルダにある、作成済の *Sensor Analysis Report.dotx* を使います。Word テンプレートでブックマークラベルを確認するには、ファイルを開いた後、メニューの**ファイル: オプション** から **Word のオプション** ダイアログを開きます。左側パネルにある**詳細設定**を選択し、右側パネルで**構成内容の表示**のセクションまでスクロールして、**ブックマークを表示する**にチェックを入れます。

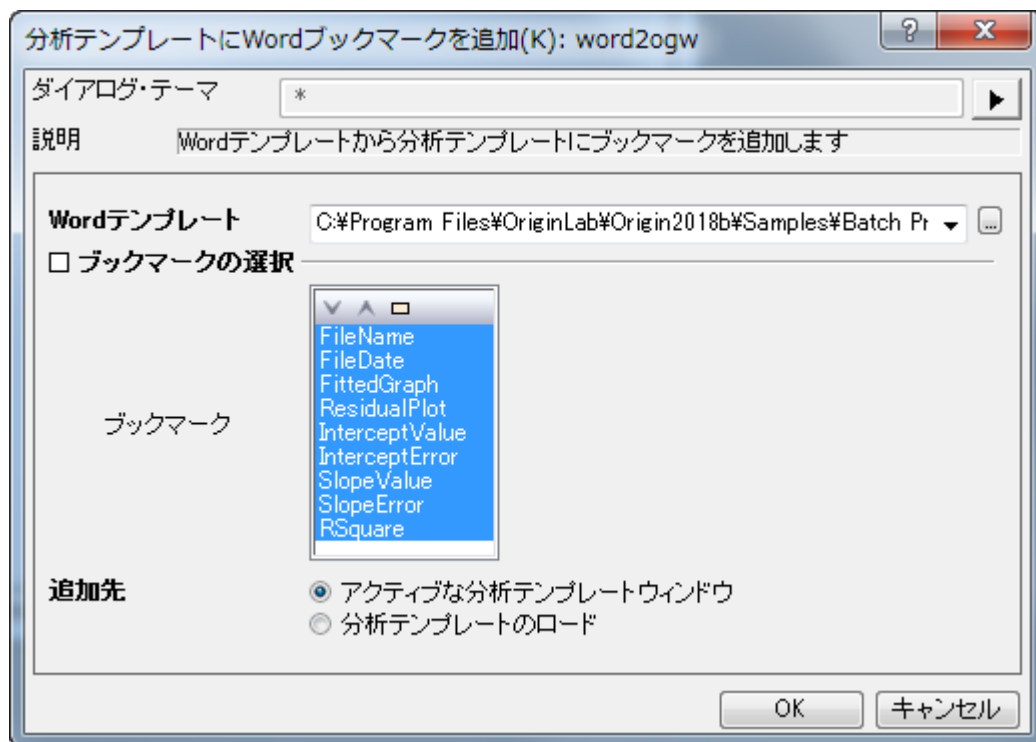
The screenshot shows a Microsoft Word document titled "Document1 - Word" with the ribbon set to "HOME". The document content is a report template for OriginLab. It features the OriginLab logo and the text "20+ years serving the scientific and engineering community". Below this is the title "Sensor Data Analysis Report". There are two fields: "File Name" with a placeholder "[FileNam]" and "File Date:" with a placeholder "[FileDat]". A "Summary Table" is present with the following data:

Summary Table	
Intercept	[InterceptValu] ± [InterceptErro]
Slope	[SlopeValu] ± [SlopeErro]
Adj. R-Square	[RSquare]

Below the table are two large empty boxes labeled "[FittedGraph]" and "[ResidualPlot]". At the bottom of the page, the status bar shows "PAGE 1 OF 1", "47 WORDS", and a zoom level of "70%".


分析テンプレートに Word ブックマークを追加

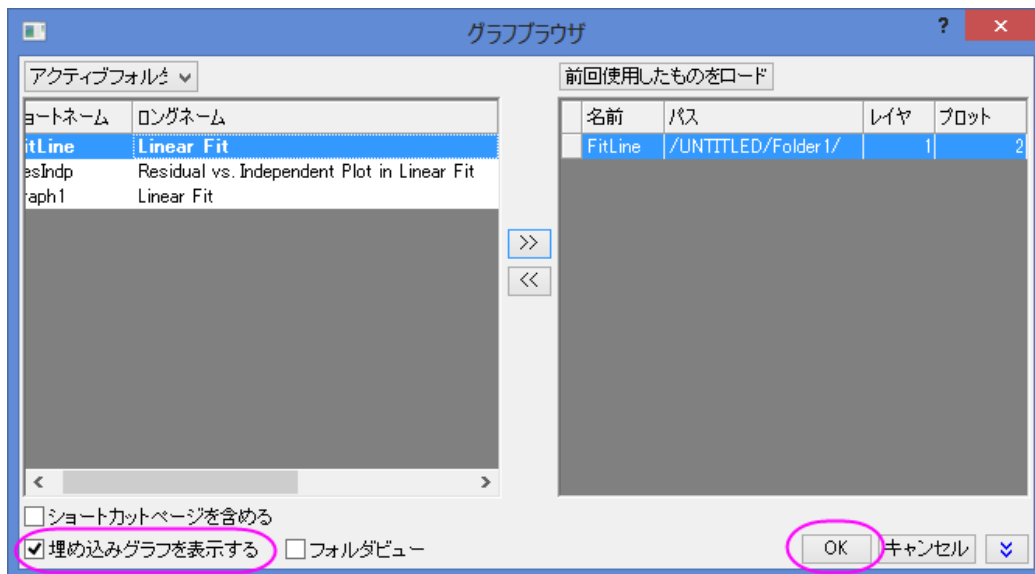
1. Origin を起動します。**開く**を選択し、<Origin EXE folder>\Samples\Batch Processing\ フォルダを検索し、**Sensor Analysis.ogw** を選択します。
2. ワークシート *Data* をアクティブにし、 のボタンをクリックします。<Origin EXE folder>\Samples\Curve Fitting\ フォルダを検索し、**Sensor01.dat** を選択して、分析用のデータをインポートします。
3. メニューから**ファイル: 分析テンプレートに Word ブックマークを追加する...**を選択し、ダイアログを開きます。**Word template** ボックスの右側にある、 ボタンをクリックし、<Origin EXE folder>\Samples\Batch Processing\ フォルダを参照し、**Sensor Analysis Report.dotx** を選択します。
4. **ブックマークの選択** 下の**ブックマーク** リストにある全てのブックマークエントリーを選択し、**OK**をクリックします。アクティブな分析テンプレートにそれらのブックマークエントリーが追加されます。



Word テンプレートに分析結果をリンク

1. Right click cell next to *FileName* bookmark in *Links* column (**Long Name**) and select **Insert Variable**. (ロングネームが) *Links* の列の *FileName* ブックマークの右側のセルで右クリックし、**変数の挿入**を選択します。
2. 表示されたダイアログで、情報タブをクリックし、**SYSTEM.IMPORT** のツリーノードにある、**FILENAME** を選択します。挿入ボタンをクリックします。
3. **FileDate** ブックマークにも同様に情報変数を挿入します。表示を通常の日付にするには、セル上で右クリックし、**セルのフォーマット**を選択します。

4. フォーマットのドロップダウンリストから日付を選択し、OK ボタンをクリックしてダイアログを閉じます。
5. *FittedGraph* グラフブックマークでは、新規に作成された **Bookmarks** ワークシートの(ロングネームが) *Links* の列にあるセルで右クリックし、**グラフを挿入**を選択してダイアログを開きます。表示されたダイアログで、グラフボックスの右にあるブラウザボタン  をクリックし、グラフブラウザのダイアログを開きます。左側パネルの左下にある埋め込みグラフを表示するにチェックを入れ、埋め込みグラフを表示します。挿入するグラフを選択して矢印ボタンをクリックし、右側のパネルに追加します。OK ボタンをクリックし、Bookmarks ワークシートにグラフを挿入します。



(ロングネームが) *GraphWidth* の列に、例として 250 を入力して、Word レポートに出力するグラフのサイズを調整します。

6. **ResidualPlot** ブックマークにも同様にグラフを挿入します。
7. パラメーター値に関係しているブックマークには、FitLinear1 レポートシートから値をリンクとしてコピー & ペーストすることが出来ます。これを行うには、まず、**Data・列 B"Sensor Output"の線形フィットシートのパラメーター表**を選択します。対応するデータセルをクリックして、**コピー**をクリックしてください。**Bookmarks** のシートに戻り、*Links* 列にある対象のセルの上で右クリックし、**リンクを張り付け**を選択し、レポートシートの値と Word テンプレートの間にリンクを構築します。


8. 残る他のブックマークにも、コピー&ペーストを繰り返します。ワークシートを分析テンプレートとして保存するを選択し、**Sensor Analysis Template.ogw** を分析テンプレートとして保存します。

	A(X)	B(Y)	C(Y)
ロングネーム	Bookmarks	Links	GraphWidth
コメント		1.メタデータの場合、右クリックして「変数の挿入」を選択します。 2.分析結果の場合、レポートシートからコピーリンクを貼り付けます。	リンクがグラフの場合このグラフのWordレポートにおける幅をポイント単位(72ポイント=インチ)で指定します。
Word Template		Lab#Origin2016#Samples#Batch Processing#Sens	
1	FileName	Sensor01.dat	
2	FileDate	2015/09/28	
3	FittedGraph		250
4	ResidualPlot		250
5	InterceptValue		0.11883
6	InterceptError		0.50426
7	SlopeValue		1.44803
8	SlopeError		0.07839
9	RSquare		0.9471






以前のチュートリアル "カスタムレポートの作成" のステップに従って、対象のセルに、結果をコピー&ペーストする方法を確認することが出来ます。

一度計算した結果をワードテンプレートに送り、ワードのレポートを作成

データファイルを解析して、即座にワードのレポートを作成する場合があります。上記の例から引き続いて、ブックマークワークシートに示されているように、全ての結果をワードブックマークの箇所にリンクさせて、一時的なワードレポートをアクティブなシートから作成することが出来ます。ワークシートの左上にある、ワードに出力ボタン  をクリックするだけで作成できます。

エクスポートパス ダイアログでワードレポートをどこに出力するかを設定できます。

バッチ処理及び Word と PDF ファイルに結果を出力

1. 新しいプロジェクトを開始します。
2. バッチ処理ボタン  をクリックします。
3. バッチ処理モードで、分析テンプレートをロードが選択されていることを確認してください。分析テンプレートのドロップダウンリストから、前に作成した **Sensor Analysis Template.ogw** を選択します。(リストの右側にあるボタンをクリックして、作成したフォルダを検索する必要があるかも知れません)
4. **Word** の欄にある出力先のドロップダウンリストから **PDF** を選択し、PDF として出力する設定にします。
5. **Word template** ボックスの右側にある、 ボタンをクリックし、<Origin EXE folder>\Samples\Batch Processing\ フォルダを参照し、**Sensor Analysis Report.dotx** を選択します。
6. 出力パスの右側にあるブラウザボタン  をクリックして、違うパスに出力することもオプション的に可能です。
7. ファイルリストセクションのブラウザボタンをクリックして、<Origin EXE フォルダ>\Samples\Curve Fitting フォルダから **Sensor01.dat**, **Sensor02.dat** and **Sensor03.dat** を選択します。

8. **ファイルの追加**をクリックし、**OK**をクリックします。
9. **データセット識別子**として**ファイル名**を選択します。
10. **データシート**ドロップダウンリストで、**Sheet1**が選択されていることを確認します。
11. **結果シート**ドロップダウンリストで、**概要**を選択します。
12. **中途生成されたワークブックの削除**のチェックを外します。

バッチ処理(H): batchProcess

ダイアログ・テーマ *

説明 分析テンプレートを使ってバッチ処理をし、サマリーテーブルを作ります

バッチ処理モード
 アクティブ分析テンプレートウィンドウ中に繰り返しインポート
 分析テンプレートをロード

分析テンプレート
 C:\Users\Kato\Documents\OriginLab\2016\User Files\Sensor Analysis Template.ogw

Word
 Word
 エクスポート先 PDF
 Wordテンプレート C:\Program Files\OriginLab\Origin2016\Samples\Batch Processing\Sensor Analysis Re
 エクスポートパス C:\Users\Kato\Documents\OriginLab\2016\User Files\

データソース ファイルからインポート

ワークブックのインポート設定を利用

ファイルリスト
 C:\Program Files\OriginLab\Origin2016\Samples\Curve Fitting\Sensor01.dat
 C:\Program Files\OriginLab\Origin2016\Samples\Curve Fitting\Sensor02.dat
 C:\Program Files\OriginLab\Origin2016\Samples\Curve Fitting\Sensor03.dat

データセット識別子 ファイル名

データシート Data

結果シート Result

結果シートの内容は以下に示す別のブックの出力シートに追加されます。

出力シート [Summary]Results!

中途生成されたワークブックの削除

オプション
 追加の開始行番号 1
 開始時に出力シートをクリア
 ラベル行の追加(最初のファイル)
 Excelシートに出力する場合、本チェックボックスをオンにして結果シートからラベルを追加してください。
 追加モード
 行
 列

スクリプト

OK キャンセル



PDF が出力された場所は、**メッセージログ**で表示されます。

13. 出力された PDF のバージョンレポートのサンプルは次の通りです。



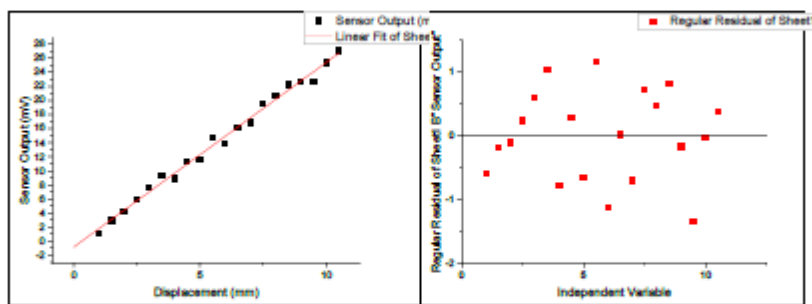
20+ years serving the scientific and engineering community

One Roundhouse Plaza, Suite 303
Northampton, MA 01060
USA

Sensor Data Analysis Report

File Name: Sensor02.dat
File Date: 9/13/2017

Summary Table		
Intercept	-0.85811	± 0.36326
Slope	2.62654	± 0.05647
Adj. R-Square	0.99129	



Fitted Curve Plot

Residual Plot



4.8.5. 複数データシートの分析テンプレートを使用したデータセットグループのバッチプロセス

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 分析テンプレートの働き](#)
- [4 ステップ](#)
 - [4.1 複数データシートの分析テンプレートを作成](#)
 - [4.1.1 連続ワークシートに CSV ファイルをインポート](#)
 - [4.1.2 ピーク範囲を取得するために非線形曲線フィットを実行](#)
 - [4.1.3 線形フィットの為のデータを準備](#)
 - [4.1.4 線形フィットを実行し、結果シートを作成](#)
 - [4.2 グループでのバッチ解析ファイル](#)

サマリー

Origin は、グループ化されたデータセットで、複数のデータシートでの分析テンプレートを使用した、バッチ解析を行うことが出来ます。

必要な Origin のバージョン: 2016 SR0 以降

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について解説します:

- 複数データシートの分析テンプレートを作成
- 分析テンプレートを使用した、グループ化されたデータセットのバッチ解析を実行

分析テンプレートの働き

<Origin EXE Folder>\Samples\Batch Processing フォルダに、作成しようとしている複数データシートの分析テンプレート **Multi-Data Sheets Analysis.ogw** があります。5つのグループになっている<Origin EXE Folder>\Samples\Batch Processing フォルダにある 10 個の CSV ファイルを、この分析テンプレートは処理します。分析テンプレートの中の連続したデータシートに、データファイルは 5 個ずつインポートされ、非線形曲線フィットでピーク面積を取得し、その各曲線の標準偏差を導き出します。最終的には、ファイル名と出力結果から抽出された温度データ対ピーク面積に線形フィットを実行します。

ステップ

複数データシートの分析テンプレートを作成

連続ワークシートに CSV ファイルをインポート

1. 新しいワークブックを作成します。メニューから **データ:ファイルからインポート:Comma Delimited (CSV)...** と進み **CSV** ダイアログを開きます。
2. <Origin EXE Folder>\Samples\Batch Processing フォルダを参照し、最初の 5 つのデータファイルを選択します。 **ファイルの種類** で *.csv が選択されていることを確認し、 **ファイルの追加** を選択して **OK** ボタンをクリックし、カンマ区切りファイル(CSV)(C):impCSV のダイアログを開きます。
3. **インポートオプション:ヘッダ行** のノードを展開し、 **サブヘッダの行数** を 2、 **ロングネーム** を 1、 **単位** に 2 を選択します。 **OK** をクリックして、インポートを完了します。

ピーク面積を取得するために非線形曲線フィットを実行

4. シート T275k の 2 行目を選択し、Ctrl + Y またはメニューの **解析:フィット:非線形曲線フィット** から **NLFit** ダイアログを開きます。
5. **Origin Basic Functions** カテゴリから、 **関数** に **Gauss** を選択します。
6. 「**フィット**」ボタンをクリックし、フィットを実行します。 **OK** をクリックして、ダイアログを閉じます。
7. 他のデータ T285k, T295K, T305K, T315K にも上記の 4,5,6 のステップを繰り返し、5 つ全てのピークに対してピーク面積を取得します。

線形フィットの為のデータを準備

8. シートのタブ **FitNLCurve5** で右クリックして **追加** を選択し、ワークシートを追加します。名前の上でダブルクリックし、 **TempData** と名前を入力します。
9. Ctrl キーを押しながら D キーを押し、 **列の追加** ダイアログを開きます。編集ボックスに 2 を入力して、2 つの列を追加します。 **OK** ボタンをクリックして、ダイアログを閉じます。
10. 4 つの列の **ロングネーム** に **Data File**, **Temperature**, **Area Value**, **Area Error** をそれぞれ入力します。
11. **Data File** 列の最初のデータセルの上で右クリックし、 **変数の挿入** をクリックしてダイアログを開きます。ダイアログの右側パネルにある **T315K** の上で右クリックし、 **シートレベルを表示** を選択して、その下のシートを表示します。 **右側のパネルの T275K** シートをクリックし、左側のパネルで **ラベル** のタブをクリックします。プロパティで **名前** の行を選択し、 **挿入** ボタンをクリックして、前に選択したセルにシート名を挿入します。
12. 他のワークシートにもこのステップを繰り返し、 **Data File** の列にシート名を追加します。
13. 次に、最初の列のシート名から温度値を抽出します。 **Temperature** の列を選択し、右クリックして **列値の設定** をクリックします。次の式を編集ボックスに入力して、ファイル名から中央の 3 つの数字を抽出します。 **OK** をクリックしてダイアログを閉じます。

```
Value (mid (col (A) , 2 , 3) $)
```


14. *FitNL1* のシートに移動し、概要の欄にあるAのセクションの下にある、2つのセルを1つずつ選択します。右クリックしてコピーを選択し、データをコピーします。*TempData* シートに移動し、*Area Value* と *Area Error* の最初の行にリンクを貼り付けます。(1つずつ行います)他の4つのデータファイルにも、このステップを繰り返します。
15. *Temperature* の列属性を **X**, *Area Error* の列属性を **Y Error** に設定します。

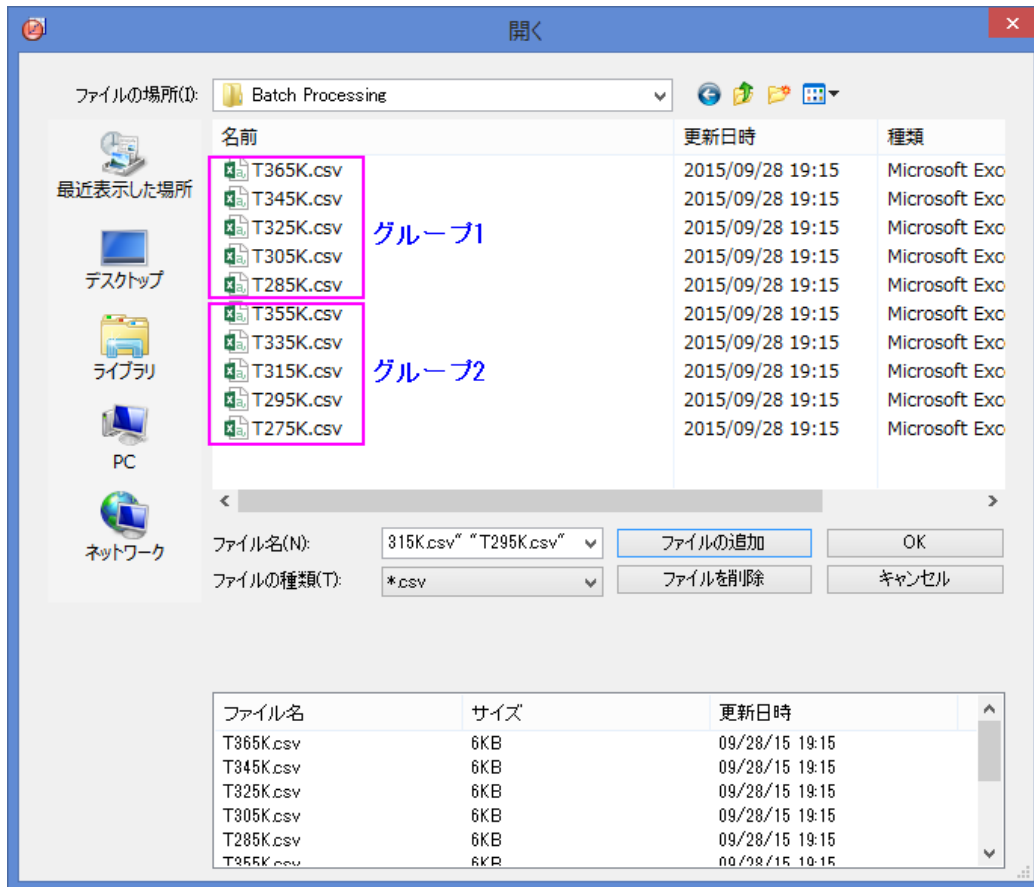
線形フィットを実行し、結果シートを作成

16. *Area Value* と *Area Error* の行を選択し、メニューの **解析:フィット:線形フィット**と進みダイアログを開きます。再計算モードを **自動**にし、**OK** を押してダイアログを閉じます。**OK** をクリックして、ダイアログを閉じます。
17. *FitLinearCurve1* シートのタブで右クリックし、**追加**を選択して新しいシートを追加し、*Results* と名前を付けます。
18. Ctrl キーを押しながら D キーを押し、**列の追加**ダイアログを開きます。編集ボックスに 3を入力して、3つの列を追加します。
19. 5つの列の**ロングネーム**に *Intercept Value*, *Intercept Error*, *Slope Value*, *Slope Error* 及び *Adj.R-Square*,とそれぞれ指定します。
20. *FitLinear1* シートに移動して、**サマリー**の下にある5つのセル値をコピーし、*Results* シートに戻り、最初のデータ行の最初のセルをクリックして、リンクとして貼り付けます。
21. メニューから**ファイル:ワークシートを分析テンプレートとして保存**を選択し、分析テンプレートとして保存して、*Multi-Data Sheets Analysis* と名前を付けます。

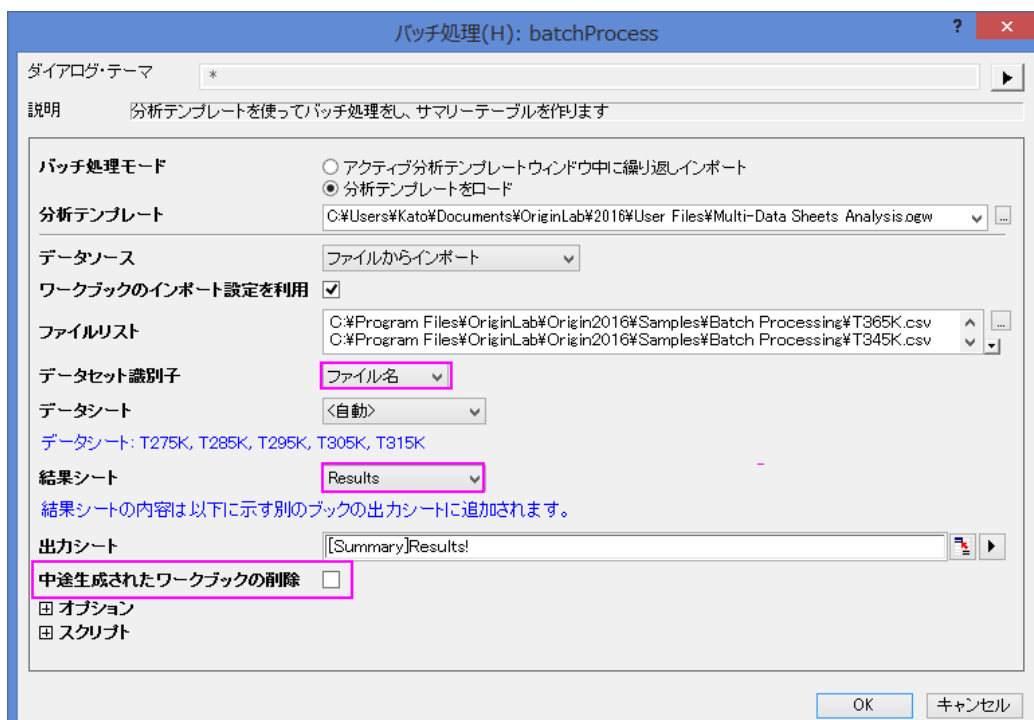
グループでのバッチ解析ファイル

<Origin EXE Folder>\Samples\Batch Processing フォルダに、10個の CSV データファイルがあります。これらを2つのグループに分け、次のように並べ替えます。group 1 は *T365K*, *T345K*, *T325K*, *T305K*, *T285K*、グループ2は *T355K*, *T335K*, *T315K*, *T295K*, *T275K* です。上記のプロセスで作成した分析テンプレートを使って、これら2つのグループ化されたファイルを処理します。

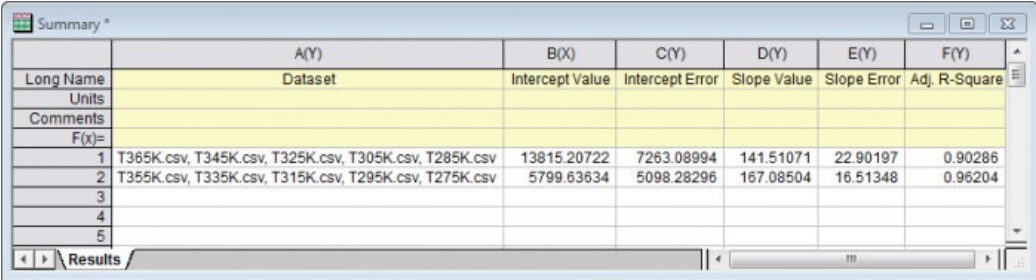
1. メニューから**ファイル:バッチ処理**のダイアログを開き、**分析テンプレート**の編集ボックスの隣にある、more option のボタンをクリックし、**Multi-Data Sheets Analysis.ogw** 分析テンプレートを検索します。
2. **ファイルリスト**の隣にある more option のボタンをクリックして、**開く**ダイアログを開きます。まず、次のようにそれらのデータを一つずつドラッグアンドドロップで順番を並べ替え、**ファイルの追加** ボタンをクリックして、リストにファイルを追加します。**OK** ボタンをクリックして、ダイアログを閉じます。



3. データセット識別子をファイル名、結果シートを解析結果に設定します。中途生成されたワークブックの削除のチェックを外します。



4. **OK** ボタンをクリックして、処理を開始します。OK ボタンを押してバッチ処理ダイアログの設定を分析テンプレートに保存します(これは Origin 2018b より可能です)。次のように、解析結果はサマリーのワークブックに出力されます。



The screenshot shows a window titled "Summary *". It contains a table with the following data:

	A(Y)	B(X)	C(Y)	D(Y)	E(Y)	F(Y)
Long Name	Dataset	Intercept Value	Intercept Error	Slope Value	Slope Error	Adj. R-Square
Units						
Comments						
F(x)=						
1	T365K.csv, T345K.csv, T325K.csv, T305K.csv, T285K.csv	13815.20722	7263.08994	141.51071	22.90197	0.90286
2	T355K.csv, T335K.csv, T315K.csv, T295K.csv, T275K.csv	5799.63634	5098.28296	167.08504	16.51348	0.96204
3						
4						
5						

At the bottom of the window, there is a "Results" tab and a scroll bar.

5 統計

5.1.1. 記述統計

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 グループに対する度数情報を検索する](#)
- [4 グループ化したデータの記述統計を計算する](#)
- [5 統計計算結果を使って、さらに操作を続ける](#)
- [6 異なるインジケータ間の関係を分析する](#)
- [7 カテゴリー値をコントロールする](#)

サマリー

Origin は、基本統計(平均、中央値、分散など)、度数カウント、選択したデータの相関係数など、包括的な記述統計をサポートしています。強力なグラフ作成機能に加えて、Origin の統計ツールはデータをまとめたり、分析するのに役立ちます。

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

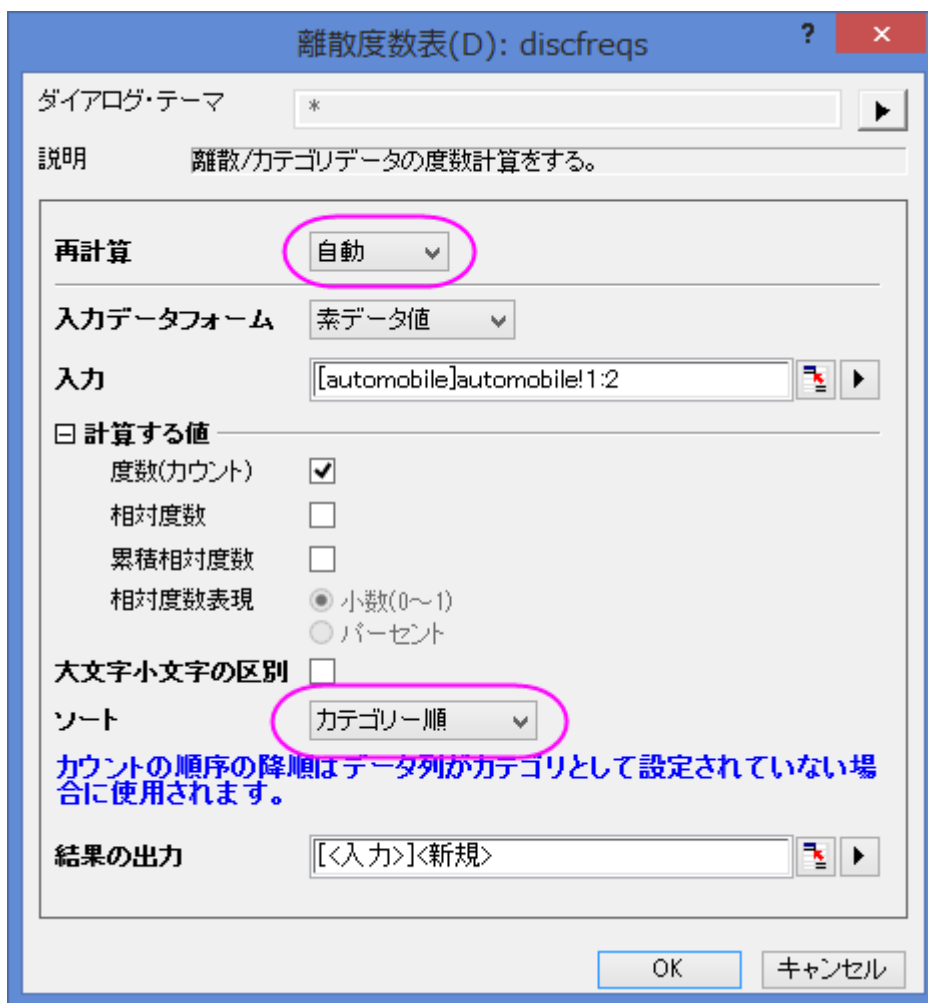
- **列の統計**ダイアログを使って、グループ化した記述統計を計算する
- さらに処理するために、新しいワークシートに統計結果をコピーする
- 指定した列内のワークシートデータを属性ごとにソートする
- **相関係数**ツールを使ってデータセットを分析する

必要な Origin のバージョン: Origin 2015 SR0 以降

グループに対する度数情報を検索する

離散度数ツールを使って、データの度数情報を素早く取得することができます。

1. 新規ワークブックを作成します。メインメニューの**データ:ファイルからインポート:単一 ASCII ファイル**を選択し、`\Samples\Statistics` フォルダの **automobile.dat** をインポートします。
2. ワークシート **automobile** の 1 列目と 2 列目を選択します。メインメニューの**統計:記述統計:離散度数表**を選択し、ダイアログを開きます。再計算モードはドロップダウンから**自動**を選択します。元データシートの[カテゴリー値をコントロールする](#)が動くように、**データのソートをカテゴリー順に変更**します。**OK** をクリックします。




3. 結果シート **DiscretFreq1** に、Year と Make 列のデータ項目と度数カウントがそれぞれ出力されます。

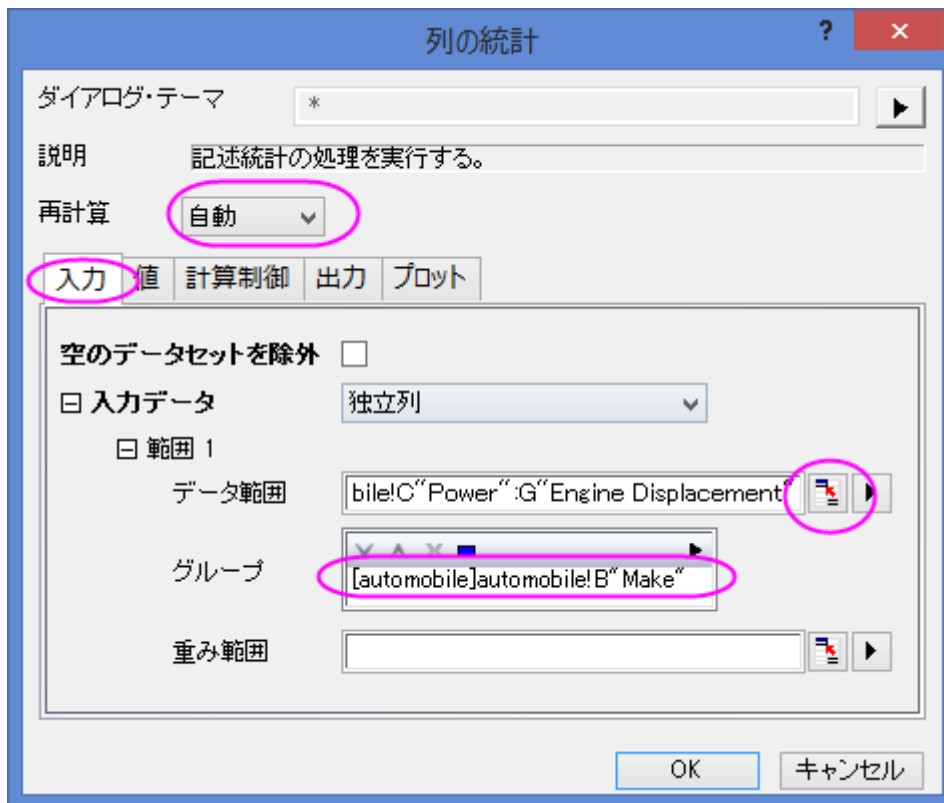


各列には鍵マークが表示され、再計算モードがオンになっていますが、このワークシートデータに対して操作を加えることが可能です。例えば、メニューのワークシート: ソート(ワークシート)を選択して昇順や降順、カスタムと選択すると、データをソートできます。

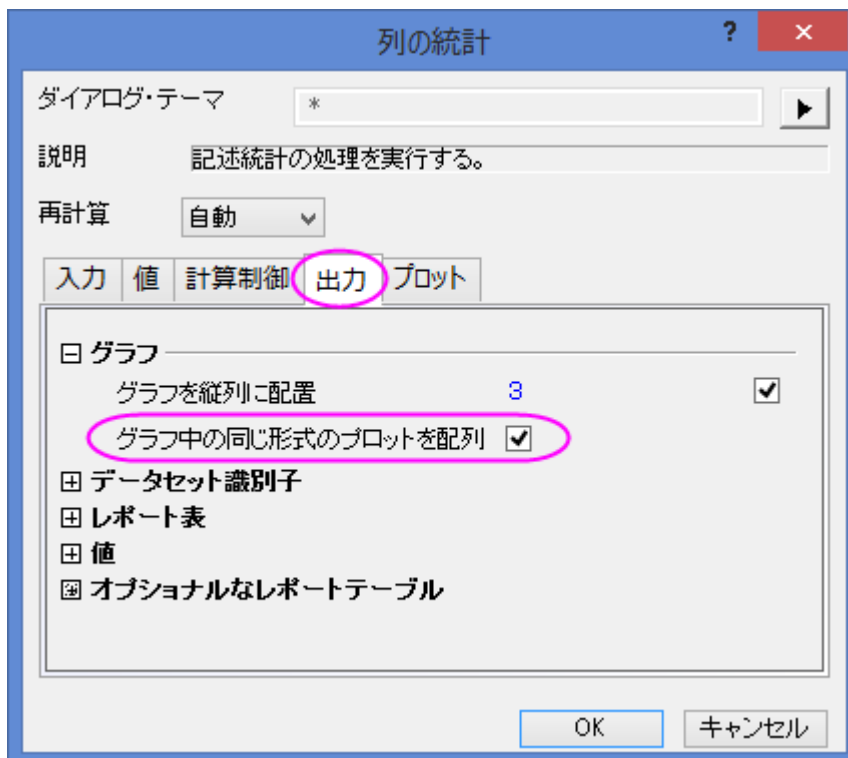
グループ化したデータの記述統計を計算する

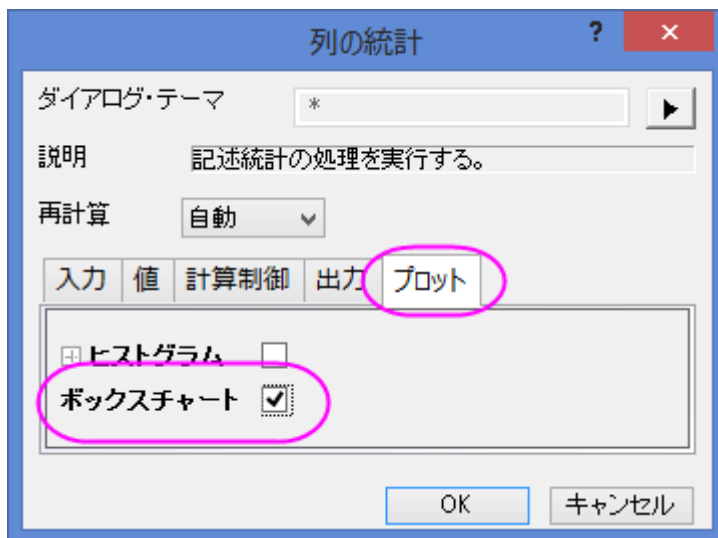
列の統計ツールを使用すると、各列のデータそれぞれの基本統計を計算できます。

1. ワークシート **automobile** に戻ります。メインメニューの統計: 記述統計: 列の統計を選択し、ダイアログを開きます。
2. 列の統計ダイアログで、入力タブの範囲 1 ブランチを開き、データ範囲の右側にある  ボタン をクリックします。ダイアログが小さくなりますので、ワークシートに戻って列 C から列 G までのデータ範囲をドラッグで選択してセットします。小さくなったダイアログにあるボタンをクリックし、ダイアログを元に戻します。ダイアログボックスで、範囲1の下にある入力データを調整した後、グループ制御ボックスの右上にある矢印をクリックし、**B(Y): Make** をグループデータとして選択します。再計算モードはドロップダウンから自動を選択します。

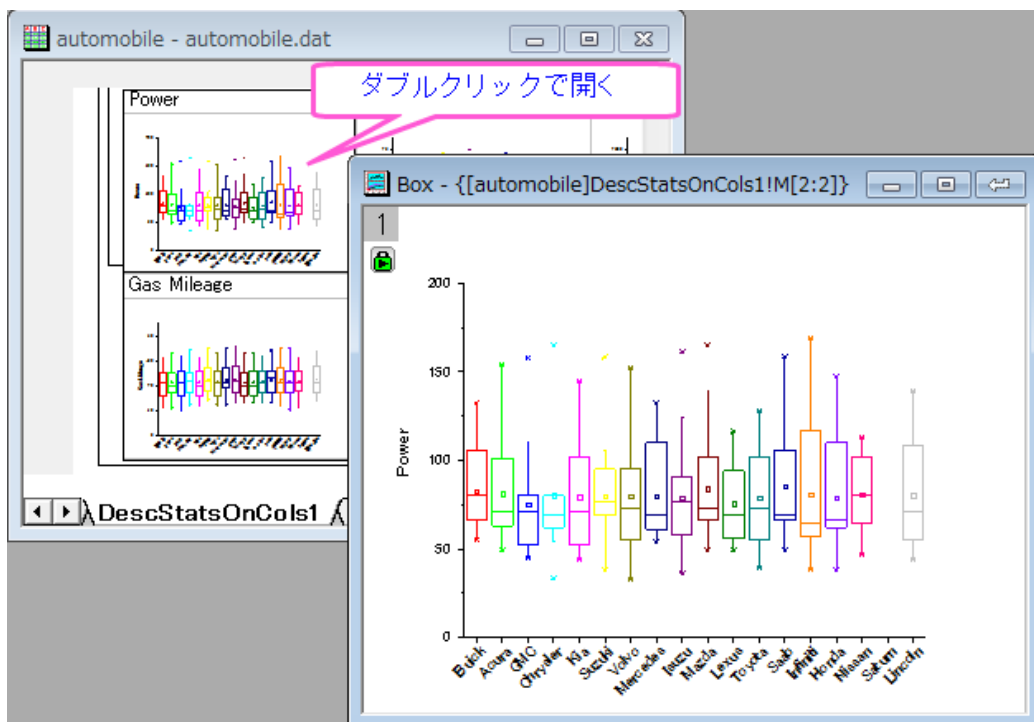


3. 出力設定ノードを開き、さらにグラフ配置ノードを開きます。グラフ中の同じ形式のプロットを配列にチェックを付け、プロットノードを開いてボックスチャートをチェックします。





4. **OK** をクリックし、レポートシートに結果を表示します。





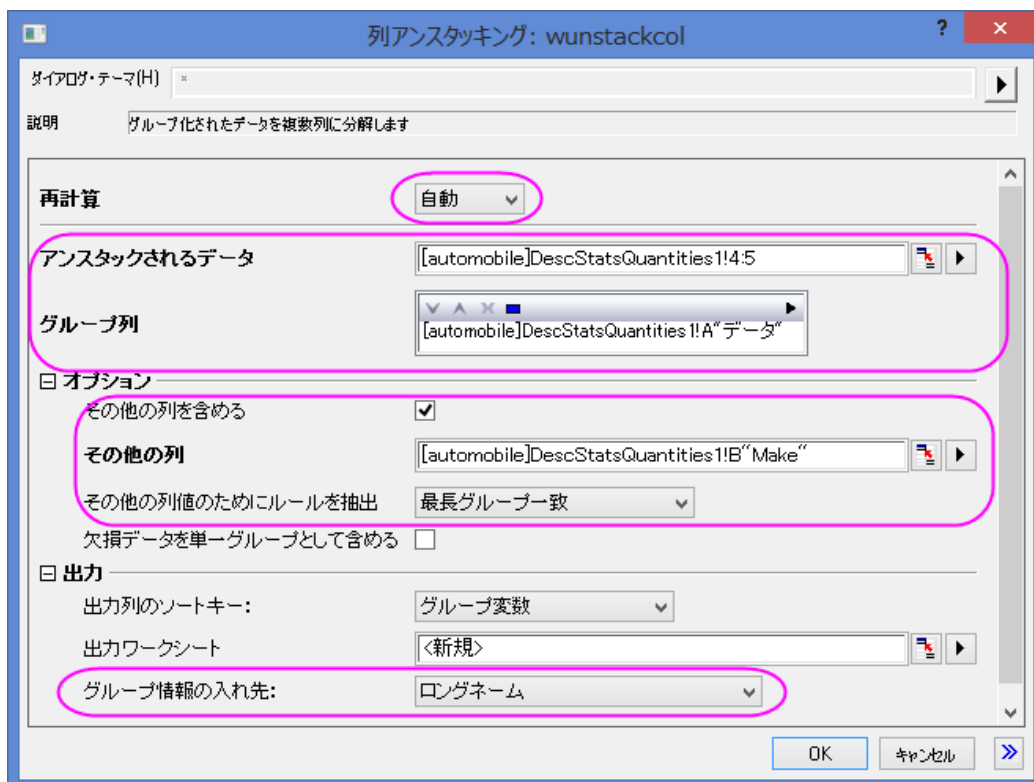
レポートシート内の埋め込みボックスプロットを編集するためには、そのボックスプロットをダブルクリックして開きます。グラフを編集したら、開いたグラフウィンドウの右上にある戻るボタンをクリックし、レポートシートに編集したグラフを戻します。

統計計算結果を使って、さらに操作を続ける

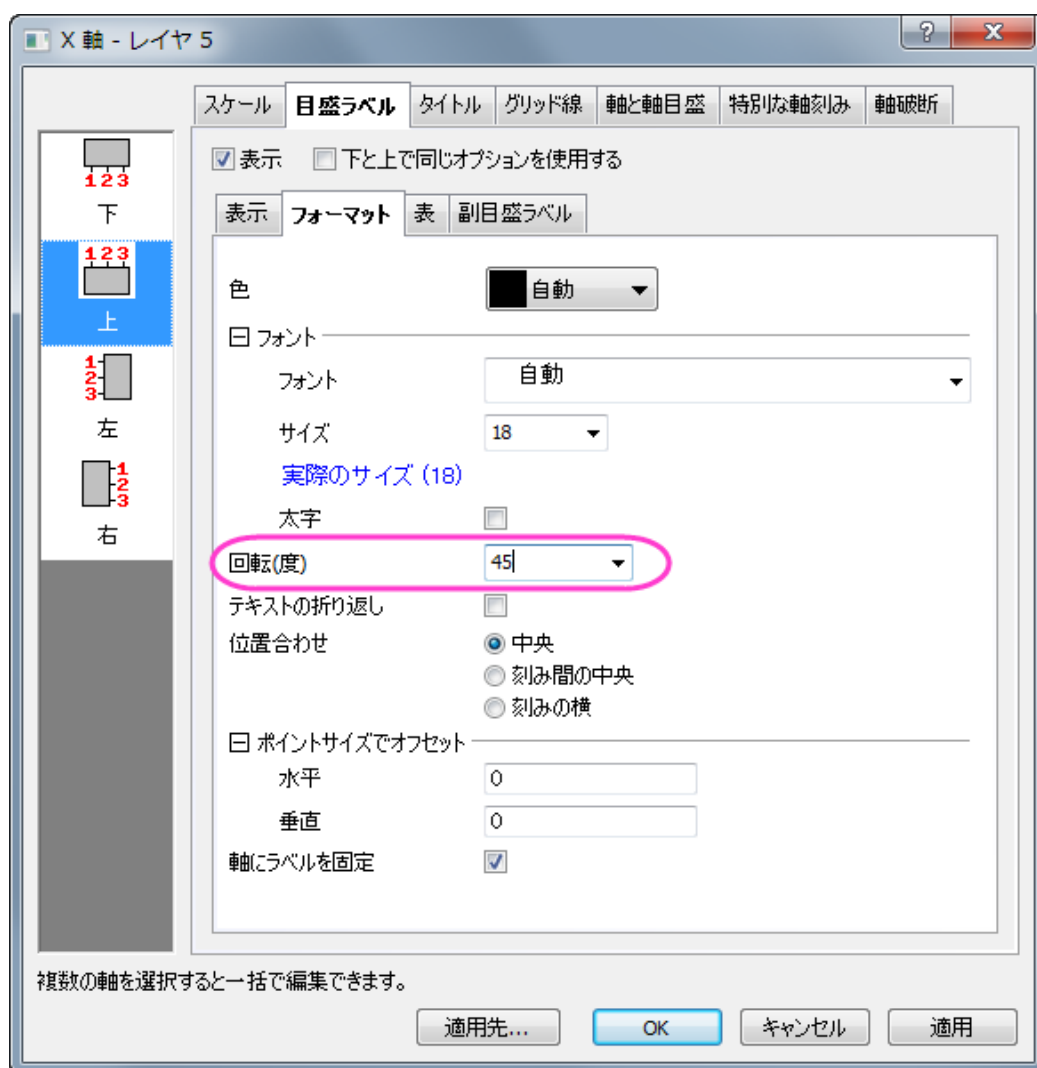
統計結果をさらに分析したり、統計結果をプロットすることができます。

例えば、Make が 1992 から 2004 までの自動車の属性値(馬力、0-60mph 時間、重量、燃費)の平均を取得し、以下を実行します。

1. ワークブック **automobile - automobile.dat** に戻り、**DescStatsQuantities1** シートを開きます。列 **D(Y2)** と **E(yEr±)** を選択し、メインメニューのワークシート:**列アンスタッキング**を選択してダイアログを開きます。
2. **wunstackcol** ダイアログで、**再計算**モードを**自動**に設定し、**グループ化列**ではコンテキストメニューボタン  をクリックして **A(X1)** データを選択します。
3. **オプション**ノードを開き、**その他の列を含める**のチェックボックスにチェックを付けます。**その他の列**で  ボタンをクリックして表示されるコンテキストメニューから列 **B(X): Make** を選択します。そして、ルールを抽出に関しては**最長グループ一致**を選択します。その他の列値のためにルールを抽出では**最長グループ一致**を選択し、**出力設定**ノードでは**グループ情報の入れ先**で**ロングネーム**を選択します。**OK** をクリックします。

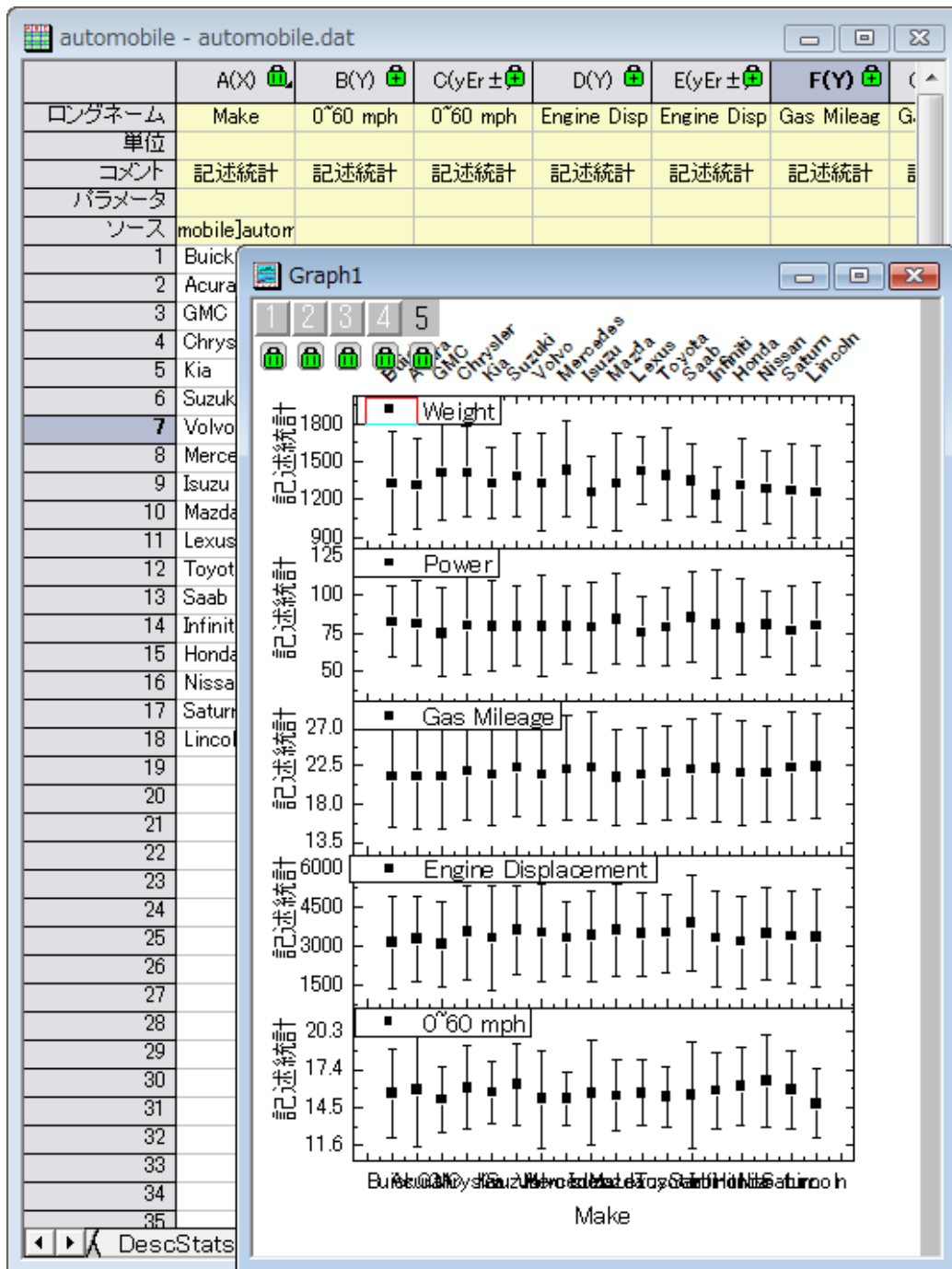


4. 結果を視覚化するために、グラフを作図します。結果シート **UnstackCols1** を開き、ワークシート全体を選択してメインメニューの**作図: 基本の 2D グラフ: 積み上げ**を選択して作図します。
5. **積み上げ:plotstack** ダイアログボックスで**プロットタイプ**を**散布図**に設定します。**OK** をクリックします。
6. 表示されたグラフで、上 X 軸の目盛りラベルを 45 度回転させます。X 軸ラベル上でダブルクリックして開く**軸**ダイアログで上アイコンを選択した状態で下図のよう設定します。**OK** をクリックします。



同じ要領で、下のラベルも同じように回転させます。

7. レポートシートとグラフは下図のようになります。

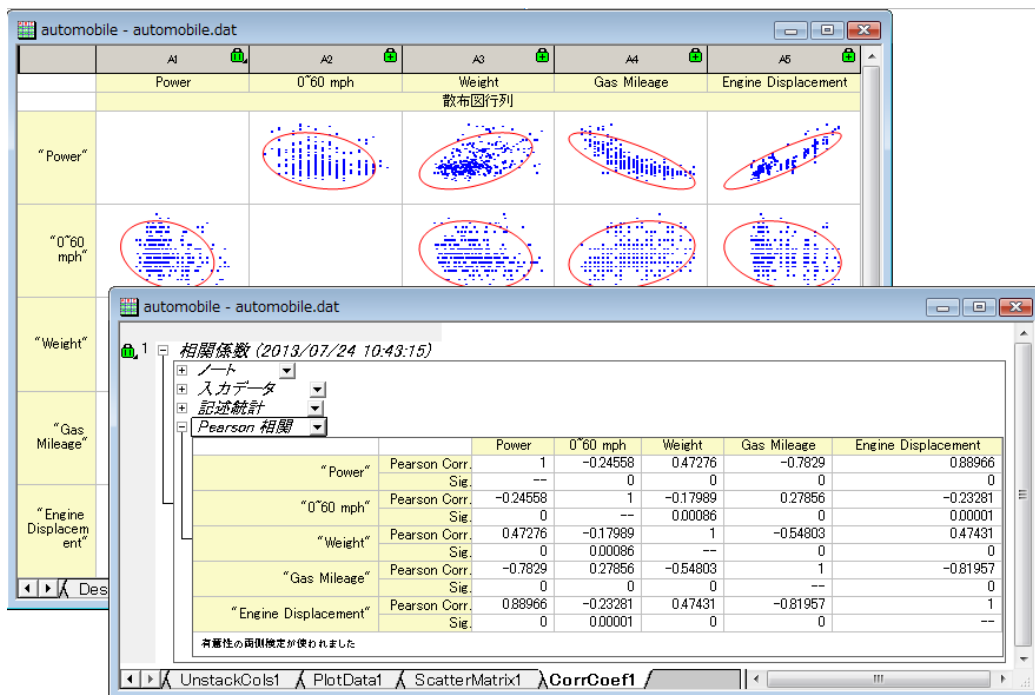


異なるインジケータ間の関係を分析する

相関係数を使って、自動車のデータの列間の関係を調べることができます。また、散布図行列と信頼楕円をプロットして、相関を視覚的に見ることができます。

1. ワークブック `automobile - automobile.dat` の `automobile` シートを開き、最後の 5 列を選択します。
2. メインメニューの **統計: 記述統計: 相関係数** を選択し、ダイアログを開きます。開いた `corrcoef` ダイアログで **相関タイプ** をピアソンにします。


3. プロットノードを開き、信頼楕円の追加チェックボックスにチェックを入れます。散布図チェックボックスは自動的に選択されます。OK をクリックします。
4. ScatterMatrix1 と CorrCeof1 シートは以下ようになります。Engine Displacement と Power には、正の強い相関があり、Gas Mileage と Engine Displacement には負の強い相関があることがわかります。



カテゴリー値をコントロールする

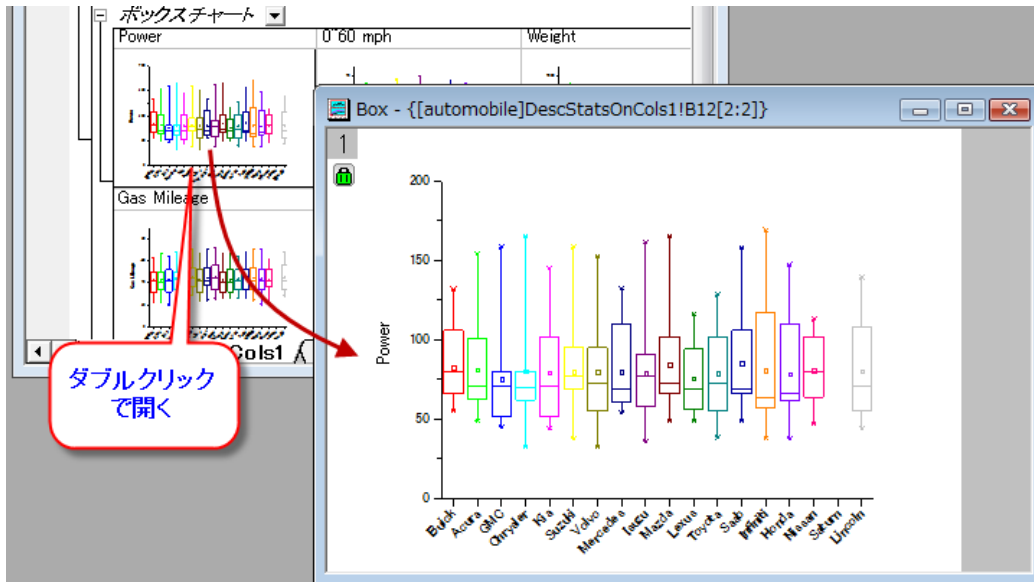
1. 以下のステップでは元データを変えず、グラフに表示されている値の順番を変更します。ワークブックの列 B で右クリックしてコンテキストメニューでカテゴリーとして設定を選択します。列のカテゴリーセルにある「ソートなし」をダブルクリックしてカテゴリーダイアログを開きます。

	A(X)	B(Y)	C(Y)	D(Y)
ロングネーム	Year	Make	Power	0~60 mph
単位			kw	sec
コメント				
F(x)=				
スパークライン				
カテゴリー		ソートなし		
1	1992	Buick	132	14
2	1992	A	154	12
3				13
4				10
5				12
6				10
7				14
8	1992	Mercedes	132	14
9	1992	Acura	128	13
10	1992	Isuzu	124	17
11	1992	Mazda	110	10
12	1992	Lexus	116	14

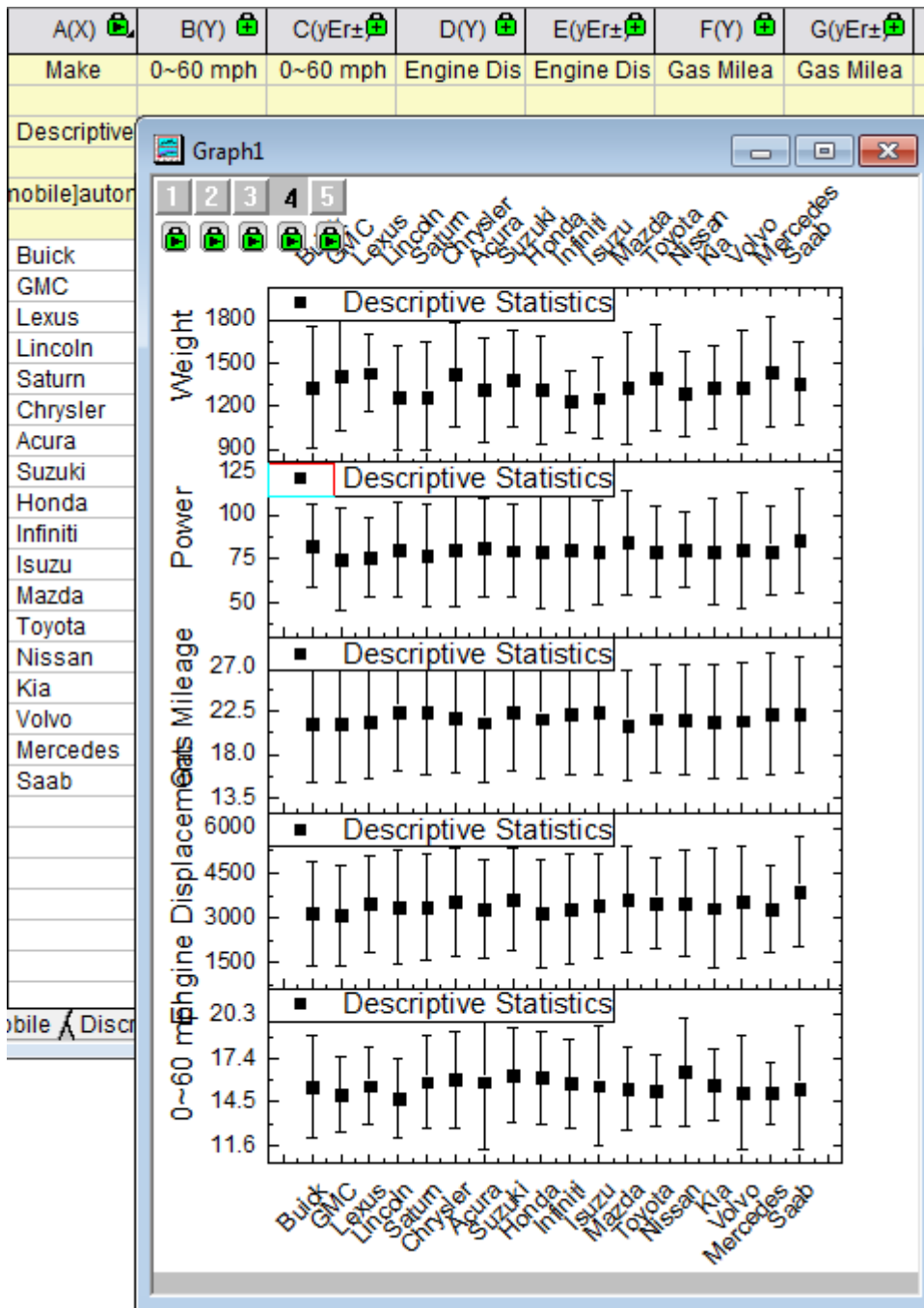
2. **カテゴリーの編集**にチェックを入れ、矢印ボタンを使ってそれぞれの項目の位置を以下の図のように設定します。これにより、製造元がある国順(アメリカ→日本/韓国→ヨーロッパ)に並び替えます。**OK**をクリックしてダイアログを閉じます。





- 上記セクションで作成したレポートシートを確認すると、並び順に反映されていることが分かります。再計算モードで自動が選択されているため、**度数離散表と列の統計のワークシート(ボックスチャートを含む)**に自動的に反映され、**カテゴリデータで指定した並び順**になります。



- 列アンスタッキング**を行った結果とグラフも自動的に更新されます。



結果が自動的に更新されていない場合、手動で更新させる方法もあります。標準ツールバーの再計算ボタン  をクリックすると、更新します。再計算が行われると、ボタンは緑色  になります。

5.1.2. クロス集計

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ユーザストーリー](#)
- [4 データ分析の準備をする](#)
- [5 クロス集計の実行](#)
- [6 結果の解釈](#)
 - [6.1 度数分布](#)
 - [6.2 年齢と経済状況の関係の検出](#)
 - [6.3 関係強度の評価](#)

サマリー

カテゴリデータの分析にはクロス集計が多く使われています。これらの分析では、分割表を使った変数の度数分布を示します。表をベースにした分析は有意な関連性があるかどうかを決定し、関連性の強さと方向を作成して、一致対データの一致を計測して検定します。

必要な Origin のバージョン: Origin 2016 SR0

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

1. クロス集計の実行の方法
2. 結果の解釈方法

ユーザストーリー





これは、1992年5月に実行された、418人のうち209人から得られた人口に関連する世論調査データ **Montana Economic Outlook Poll** です。これには、変数が7つあります。**年齢**(35才より下,35-54才,55才以上)、**性別**(男性、女性)、**経済状況**(昨年より:悪い、同じ、良い)等。データから得たい情報は下記です。

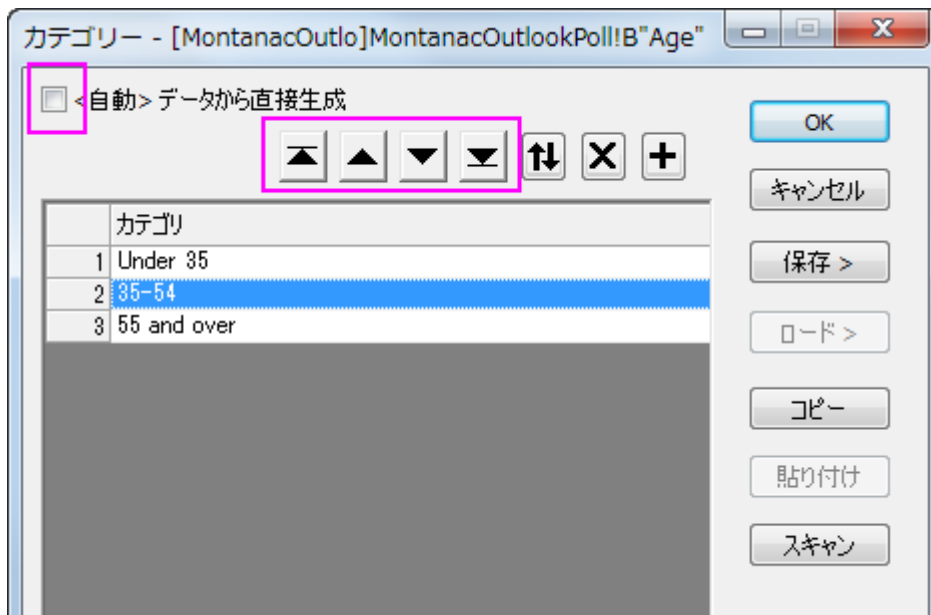
1. 3つの異なる年齢グループでの経済状況の度数分布と、分布の中で男性と女性がどのように異なるか。
2. 男性と女性のグループに対して、経済状況と年齢の明らかな関係性があるか。
3. これらの相関性の強さ。

データ分析の準備

1. 新しいプロジェクトまたは新しいワークブックを開きます。`\Samples\Statistics\MontanacOutlookPoll.dat` のデータファイルをインポートします。

2. 分類値をソートします。

- MontanacOutlookPoll ワークシートで、**B** 列を選択して右クリックし、**カテゴリー**として設定を選択します。カテゴリー行にある**ソートなし**をダブルクリックして、**カテゴリーダイアログ**を開きます。**カテゴリーの編集(追加、削除、任意の順)** box.最上部に移動のボタン 、上に移動のボタン 、下に移動のボタン  最下部に移動のボタン  を使って、"35 才より下、"35-54 才" と"55 才以上"の順に並べ替えます。



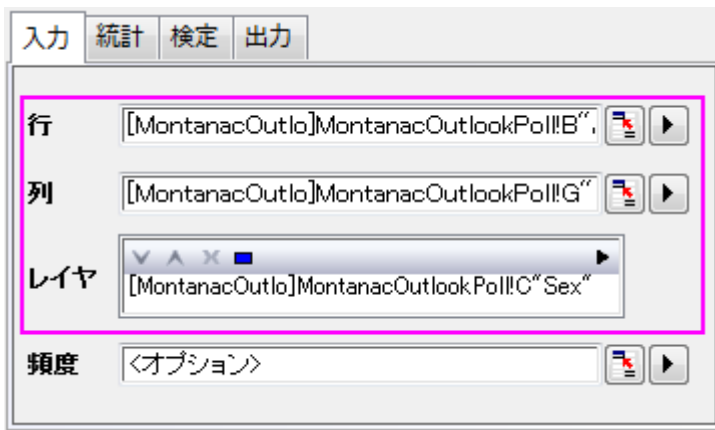
- カテゴリーマッピングが<Female, Male>になるように、列 **C** に繰り返します。
- カテゴリーマッピングが<Better, Same, Worse>になるように、列 **C** に繰り返します。



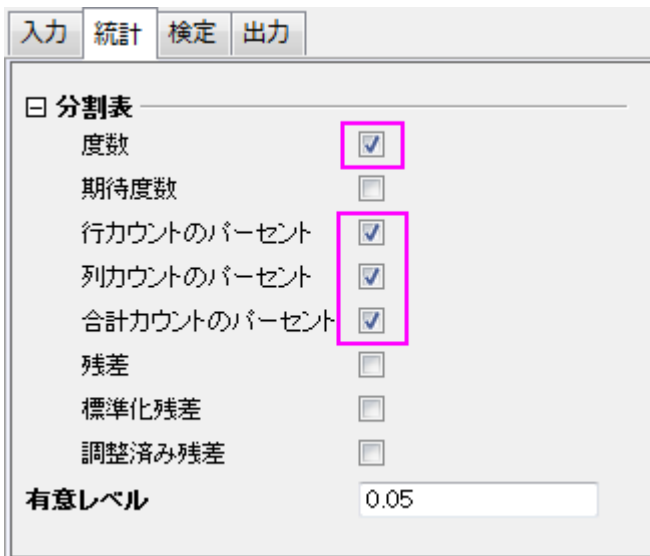
解析から欠損値を取り除くため、カテゴリーとして列を設定します。または、欠損値を数値とします。

クロス集計の実行

1. メニューから**統計: 記述統計: クロス集計**と選択し、クロス集計のダイアログを開きます。
2. **入力タブ**をクリックします。データは行データモードにあるので、**B** 列、**G** 列、**C** 列をそれぞれ、**行**、**列**、**レイヤ**に選択します。



3. 統計のタブをクリックし、予測カウント、残差、標準残差、調整済み残差のチェックを外し、他はデフォルトのままにします。



4. 検定のタブで、カイ二乗検定のチェックボックスを選択します。関係性の尺度ブランチを開き、分割表の係数、Phi、クラメールの V ボックスを選択します。

入力	統計	検定	出力
カイニ乗検定		<input checked="" type="checkbox"/>	
Fisherの正確確率検定		<input type="checkbox"/>	
☐ 関連性の度合い		<input type="checkbox"/>	
名義			
O係数		<input checked="" type="checkbox"/>	
Phi		<input checked="" type="checkbox"/>	
クラメールのV		<input checked="" type="checkbox"/>	
ラムダ		<input type="checkbox"/>	
不確かさの係数		<input type="checkbox"/>	
序数			
ガンマ		<input type="checkbox"/>	
Kendall のタウ b タウ c		<input type="checkbox"/>	
SomersのD		<input type="checkbox"/>	
☒ 一致性			
☒ その他			

5. 出力タブを開き、モザイクプロットチェックを付けます。初期設定のまま、OK ボタンをクリックします。

入力	統計	検定	出力
結果ログの出力		<input type="checkbox"/>	
モザイクプロット		<input checked="" type="checkbox"/>	
クロス集計レポート		<input type="text" value="[[入力]<新規>"/>	<input type="button" value="📄"/> <input type="button" value="▶"/>
プロットデータ		<input type="text" value="[[入力]<新規>"/>	<input type="button" value="📄"/> <input type="button" value="▶"/>

結果の解釈

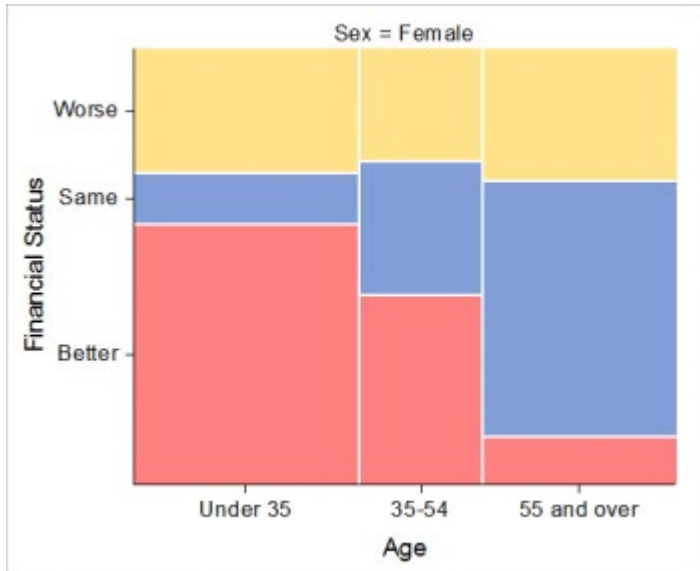
Crosstab1 シートを見てください。

度数分布

モザイクプロットと相関関係表から度数分布の情報を得ることが出来ます。モザイクプロットの中の個々の長方形範囲は、男性、女性、及び全体に対する"年齢"と"経済環境"を視覚的に比較できるように、X変数のそれぞれのレベルの中にあるY変数の割合に比例します。相関関係表から、より特化した情報を取得することが出来ます。相関関係表とモザイクプロットを併せると、次のことが分かります。

- 若い女性と高齢の女性の考え方は大きな隔たりがあります。
 - 若い女性の大多数である 59.5%は、より良い経済状況であると感じています。高齢女性の大多数である 58.3%は、経済状況は変わらないと考えています。

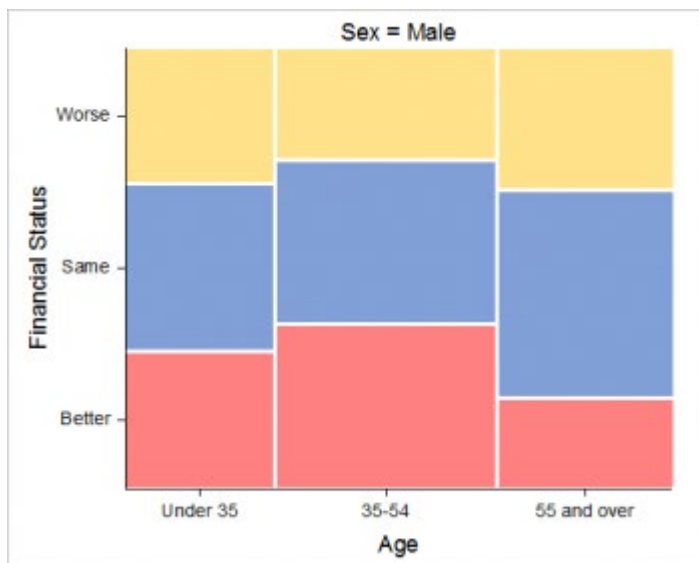
- 若い女性の少数派 11.9%は、経済状況は変わらないと考えているが、高齢女性の少数派 11.1%は経済状況は良くなっていくと考えている。



Sex = Female

		"Financial Status"				
		Better	Same	Worse	合計	
"Age"	Under 35	カウント	25	5	12	42
		行%	59.52381	11.90476	28.57143	100
		Col%	64.10256	15.15152	41.37931	41.58416
		合計%	24.75248	4.9505	11.88119	41.58416
	35-54	カウント	10	7	6	23
		行%	43.47826	30.43478	26.08696	100
		Col%	25.64103	21.21212	20.68966	22.77228
		合計%	9.90099	6.93069	5.94059	22.77228
	55 and over	カウント	4	21	11	36
		行%	11.11111	58.33333	30.55556	100
		Col%	10.25641	63.63636	37.93103	35.64356
		合計%	3.9604	20.79208	10.89109	35.64356
合計	カウント	39	33	29	101	
	行%	38.61386	32.67327	28.71287	100	
	Col%	100	100	100	100	
	合計%	38.61386	32.67327	28.71287	100	

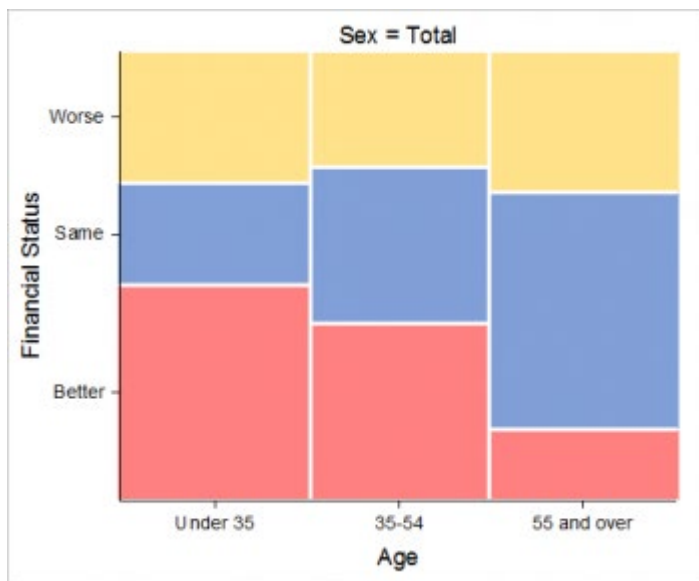
2. 経済状況について男女の考えを比較してみると、以下のような興味深い結果が得られました。
 - 男性は年齢層によって、経済状況に大きな違いは見られません。
 - 最も多い年齢層の男性は、自らの経済状況に対して、やや自信がある傾向があります。



Sex = Male

		"Financial Status"					
		Better	Same	Worse	合計		
"Age"	Under 35	カウント	9	11	9	29	
		行%	31.03448	37.93103	31.03448	100	
		Col%	28.125	25.5814	29.03226	27.35849	
		合計%	8.49057	10.37736	8.49057	27.35849	
	35-54	カウント	16	16	11	43	
		行%	37.2093	37.2093	25.5814	100	
		Col%	50	37.2093	35.48387	40.56604	
		合計%	15.09434	15.09434	10.37736	40.56604	
	55 and over	カウント	7	16	11	34	
		行%	20.58824	47.05882	32.35294	100	
		Col%	21.875	37.2093	35.48387	32.07547	
		合計%	6.60377	15.09434	10.37736	32.07547	
合計	カウント	32	43	31	106		
	行%	30.18868	40.56604	29.24528	100		
	Col%	100	100	100	100		
	合計%	30.18868	40.56604	29.24528	100		

3. 回答者の性別に関係なく、年齢による傾向があります。
- 若い男性は自らの経済状況に、自信がある傾向があります。
 - 他は、自分の経済状況が変わっていないと感じる傾向があります。



Sex = 合計

		"Financial Status"				
		Better	Same	Worse	合計	
"Age"	Under 35	カウント	34	16	21	71
		行%	47.88732	22.53521	29.57746	100
		Col%	47.88732	21.05263	35	34.29952
		合計%	16.42512	7.72947	10.14493	34.29952
	35-54	カウント	26	23	17	66
		行%	39.39394	34.84848	25.75758	100
		Col%	36.61972	30.26316	28.33333	31.88406
		合計%	12.56039	11.11111	8.21256	31.88406
	55 and over	カウント	11	37	22	70
		行%	15.71429	52.85714	31.42857	100
		Col%	15.49296	48.68421	36.66667	33.81643
		合計%	5.31401	17.8744	10.62802	33.81643
合計	カウント	71	76	60	207	
	行%	34.29952	36.71498	28.98551	100	
	Col%	100	100	100	100	
	合計%	34.29952	36.71498	28.98551	100	

年齢と経済状況の関係の検出

カイニ乗検定表は、行と列の値に結果を示します。もし、**Prob>カイニ乗**が 0.05 より小さい場合、これは、行や列の変数、ここでは年齢と経済状況は明らかに相関しています。テーブルの下にあるフットノートの結果を記録します。。つまり、

- 年齢の異なる女性は、異なる経済状況にあります。
- 反対に、男性の年齢と経済状況を関係付ける明確な根拠は見当たりません。
- 性別にかかわらず、年齢によって異なる経済状況にあります。

カイニ乗検定

		カイニ乗	DF	Prob>カイニ乗
Sex = Male	ピアソンのカイニ乗	2.61078	4	0.62491
	尤度比	2.68512	4	0.61182
Sex = Female	ピアソンのカイニ乗	24.88134	4	5.31505E-5
	尤度比	27.39901	4	1.65075E-5
Sex = 合計	ピアソンのカイニ乗	20.67931	4	3.66559E-4
	尤度比	22.06771	4	1.94652E-4

Sex = Male:
ピアソンのカイニ乗検定による
水準 0.05 で、2変数間の関連の根拠がありません。

Sex = Female:
ピアソンのカイニ乗検定による
水準 0.05 で、2変数間の関連の根拠がありません。

Sex = 合計:
ピアソンのカイニ乗検定による
水準 0.05 で、2変数間の関連の根拠がありません。
線形関係は数値データにのみ利用できます。
Continuity Correction is only available for 2*2 tables.

0.05より大きい

0.05より小さい

関係強度の評価

関係性の測定表は、「経済状況」と「年齢」の関係の強さを示します。これは、3x3 のテーブル(3つの年齢層と3つの経済状況レベル)なので、レイヤ間を比較するために、**Contingency 係数** を選択します。(3つの統計の違いについては、introduction page を参照してください) テーブルから次の内容が分かります。

- 女性の経済状況は男性よりも年齢に強く関係しています。(0.444 v.s.0.155)

相関の強さ

		値
Sex = Male	Phi	0.15694
	クラメールのV	0.11097
	C係数	0.15504
Sex = Female	Phi	0.49634
	クラメールのV	0.35096
	C係数	0.44459
Sex = 合計	Phi	0.31607
	クラメールのV	0.2235
	C係数	0.30137

Cramer's V, Contingency Coefficients: Values range from 0 to 1. A larger value indicates the stronger association of two variables.
Gamma, Kendall, Somer's D: Values range from -1 to 1. A positive value means one ordinal variable increases with the other.
Lambda, Uncertainty Coefficient: Values range from 0 to 1. A larger value indicates better prediction of Y by X.



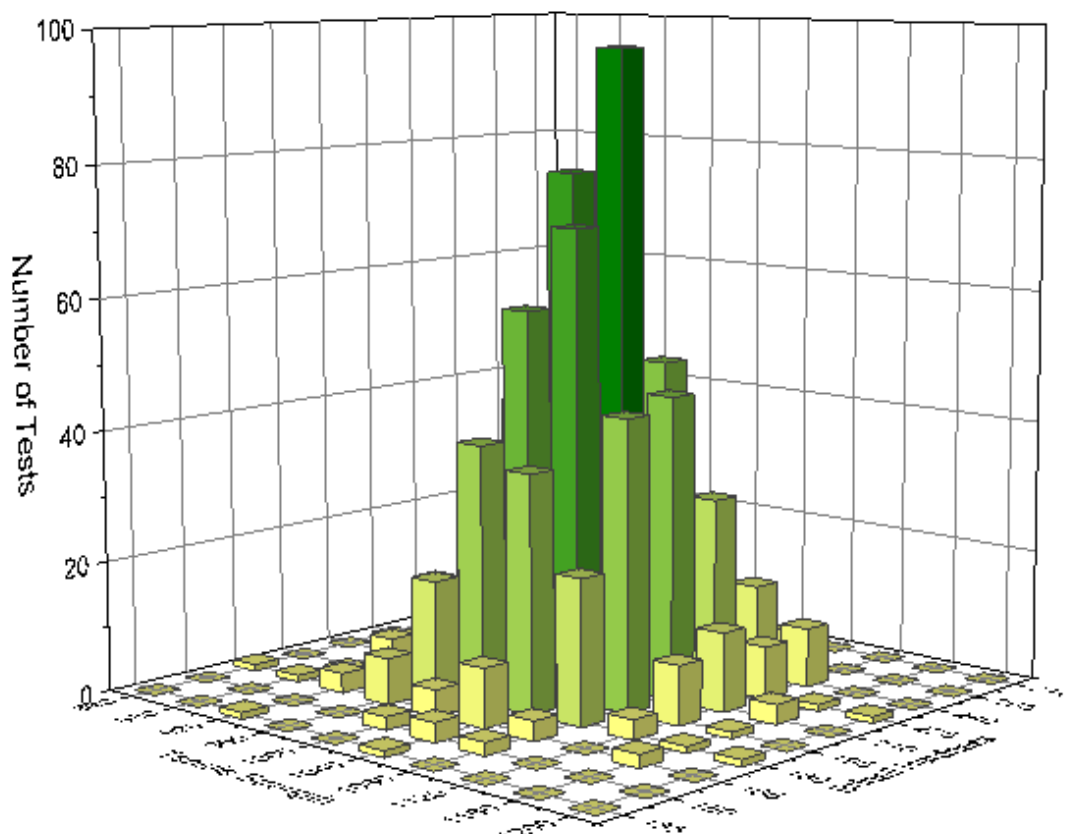
5.1.3.2D ビン化

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ステップ](#)
- [4 詳細な編集](#)

サマリー

2D 度数カウント/ビン化の操作はデータの出現頻度を 2 つの変数について数えます。このデータから 3D 棒グラフあるいはイメージプロットを作図でき、データの分布について視覚的に特徴を捉えることができます。



必要な Origin のバージョン: Origin 2015 SR0 以降

学習する項目

- 2 つの変数を使用してデータの頻度を数える方法
- 2D ビン化データを 3D ヒストグラムとして作図する

ステップ

このチュートリアルは、チュートリアルデータプロジェクト(<Origin EXE フォルダ>\Samples\TutorialData.opj)と関連しています。

1. **Tutorial Data.opj** を開き、**2D Frequency Count (Binning)** フォルダにあるブック **3D Histogram.dat** をアクティブにします。
2. 列 A と列 B を選択し、メニューから **統計: 記述統計: 2D 度数カウント/ビン化** と操作して **TwoDBinning** ダイアログを開きます。
3. ダイアログ内で次の設定を行います。
 - ビンサイズの **自動** チェックを外し、X の **ビンサイズ** 値を 40 に設定します。

- 同じように、Y のビンサイズを 15 にセットします。

2D度数カウント/ビン化(B): twoDBinning

ダイアログ・テーマ *

2元データ上で度数をカウントする。

再計算 手動

田 入力 "Tensile Strength", "Brinell Hardness"

日 "Tensile Strength" (X) [806.95 , 1191.67]

ビン化範囲を指定 ビン終端

最小ビン開始 800 自動

最大ビン終端 1200 自動

間隔 ビンサイズ ビン数

ビンサイズ 40 自動

ビン数 10

周期

田 境界オプション

出力ビン順序 昇順

日 "Brinell Hardness" (Y) [128.25 , 260.31]

ビン化範囲を指定 ビン終端

最小ビン開始 120 自動

最大ビン終端 270 自動

間隔 ビンサイズ ビン数

ビンサイズ 15 自動

ビン数 10

周期

田 境界オプション

出力ビン順序 昇順

計算する値 カウント

日 Bin Output

ビン

ビン開始

ビン中心

OK キャンセル

- ダイアログの最後にある出力行列にチェックをつけ、表示される行列プロットでは 3D 棒グラフを選択します。

出力ワークシート <新規>

各ビンYの小計カウント

出力行列 <新規>

日 行列プロット

3D棒グラフ

イメージプロット

4. OK ボタンをクリックすると、次の出力が表示されます。

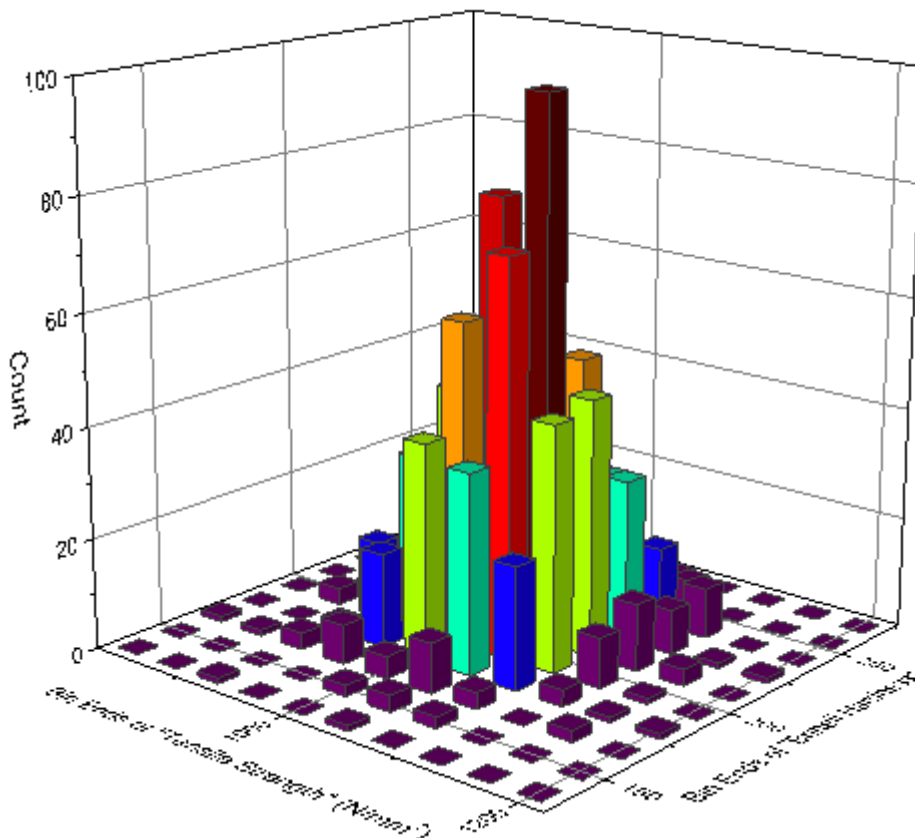
○ ワークシート

	A(X)	B(Y)	C(Y)	D(Y)	E(Y)	F(Y)	G(Y)
ロングネーム	終了のピン "Tensile Strength"	カウント	カウント	カウント	カウント	カウント	カウント
単位							
コメント		120 - 135	135 - 150	150 - 165	165 - 180	180 - 195	195 - 210
開始のピン "Brinell Hardness"		120	135	150	165	180	195
中心のピン "Brinell Hardness"		127.5	142.5	157.5	172.5	187.5	202.5
終了のピン "Brinell Hardness"		135	150	165	180	195	210
F(x)=							
1		840	0	0	1	0	0
2		880	0	0	1	0	3
3		920	1	0	3	2	14
4		960	0	0	7	17	32
5		1000	0	2	4	39	58
6		1040	1	3	9	36	71
7		1080	0	2	3	22	46

○ 行列

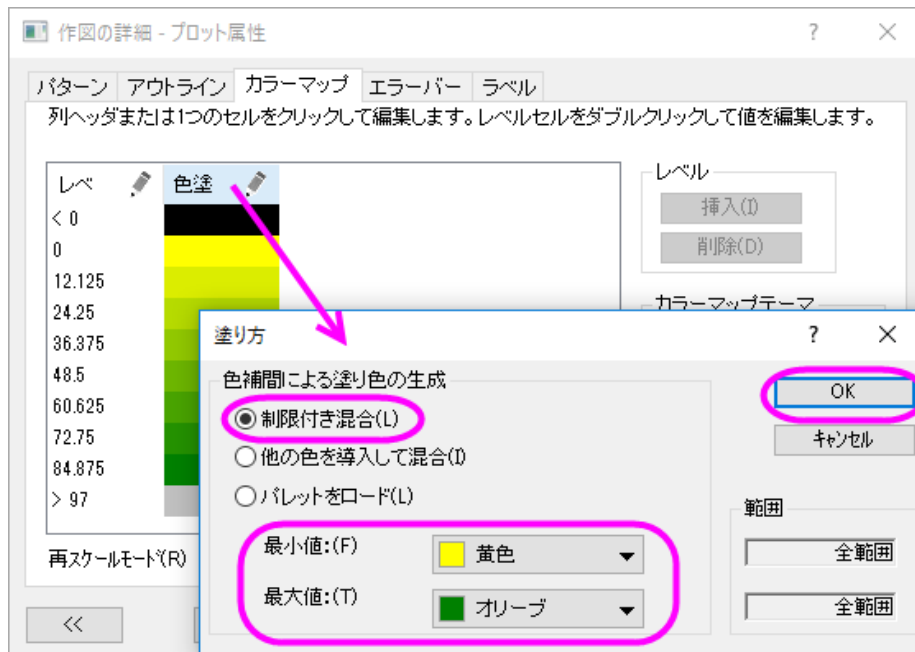
	1	2	3	4
1	0	0	1	0
2	0	0	0	0
3	1	1	3	7
4	0	0	2	17
5	0	3	14	32
6	0	1	11	42
7	0	0	10	37
8	0	0	10	17
9	0	0	1	6

○ 3D ヒストグラム



詳細な編集

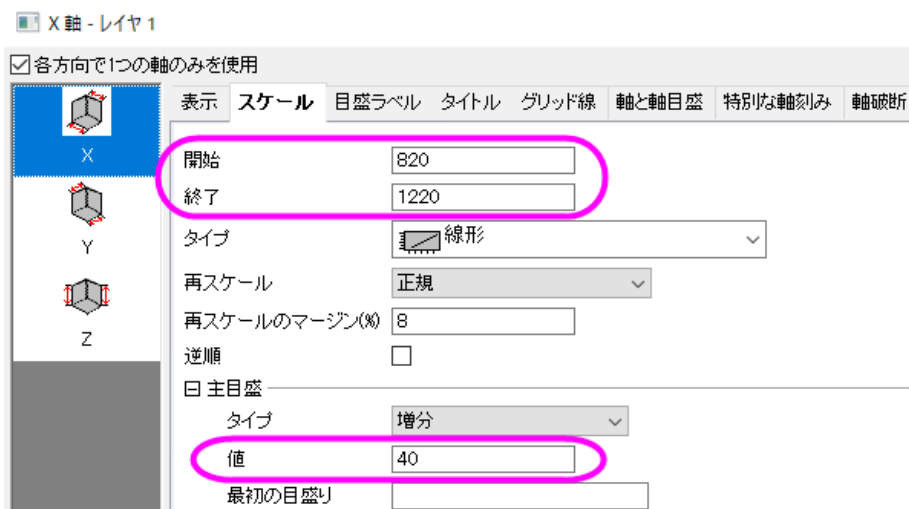
1. 3D ヒストグラムをダブルクリックして作図の詳細ダイアログを開きます。カラーマップタブを開き、色塗りヘッダをクリックして塗り方ダイアログを開き、以下の図のように設定します。



OK をクリックして塗り方ダイアログを閉じ、もう一度 OK をクリックして作図の詳細ダイアログを閉じます。

2. 軸をダブルクリックして軸ダイアログを開きます。スケールタブを指定して XYZ 軸をそれぞれ以下の図のように設定します。

- X アイコンを選択して X 軸のスケールを開始 820、終了 1220、主目盛の値を 40 に設定します。



- Y アイコンを選択して Y 軸のスケールを開始 127.5、終了 277.5、主目盛の値を 15 に設定します。
- Z アイコンを選択して Z 軸のスケールを開始 0、終了 100、主目盛の値を 20 に設定します。

4. タイトルタブを開き、X 軸、Y 軸、Z 軸のタイトルをそれぞれ「*Tensile Strength*」、「*Brinell Hardness*」、「*Number of Tests*」に設定します。OK をクリックしてこの設定を適用して、ダイアログを閉じます。



5.1.4. 分布フィット

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ユーザストーリー](#)
- [4 分布を選ぶ](#)
- [5 分布フィットを実行](#)
- [6 フィットモデルを比較し選択する](#)
- [7 推定を行う](#)

サマリー

データの分布モデルを知ることは正しい解析を行っているのか確認する際に役立ちます。分布フィットツールは、ユーザの手元にあるデータの分布を確認し、分布のパラメータを推定します。

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- 実用的なデータから分布フィットを行う
- 算出された結果の読み取り方

ユーザストーリー

建築業者の人が次年度に何軒の家を新築するべきか、近隣地域の家の売り上げデータを元に、設定しようとしています。ユーザが知りたいことは以下の通りです。

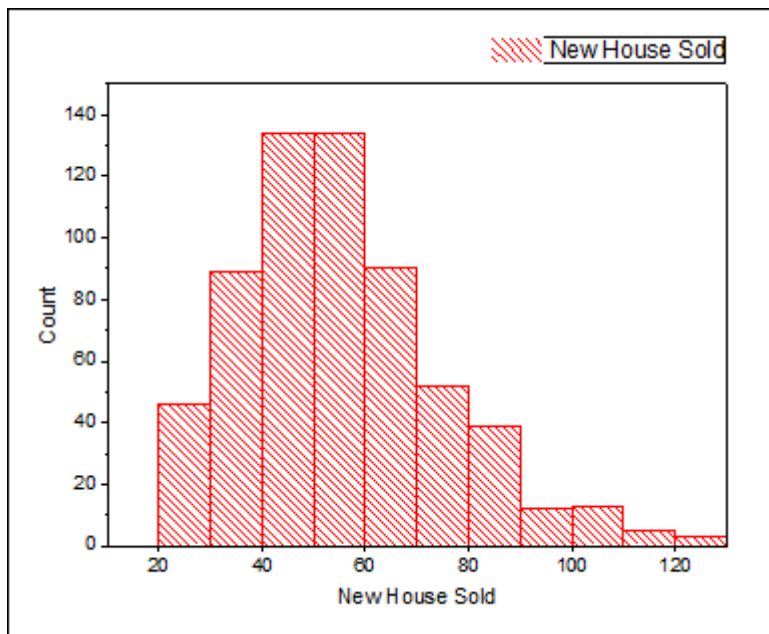
- もし、80 軒の家を新築する場合、全てが売れる確率はどれほどになるでしょうか。
- 最低でも 60% の確率であれば、利益を上げることができると建築業者は考えています。何軒の家を建てるべきでしょうか。

この問題を解くためには、不動産屋は次のことを調べる必要があります。

- サンプルデータ(近隣地域での家の売り上げ情報)に分布フィットを実行
- 最もよくフィットする分布を選択する
- 選択した分布で累積分布関数による確率を計算する
- 確率が 60% よりも大きい場合、スケジュールを再度確認する

分布を選択する

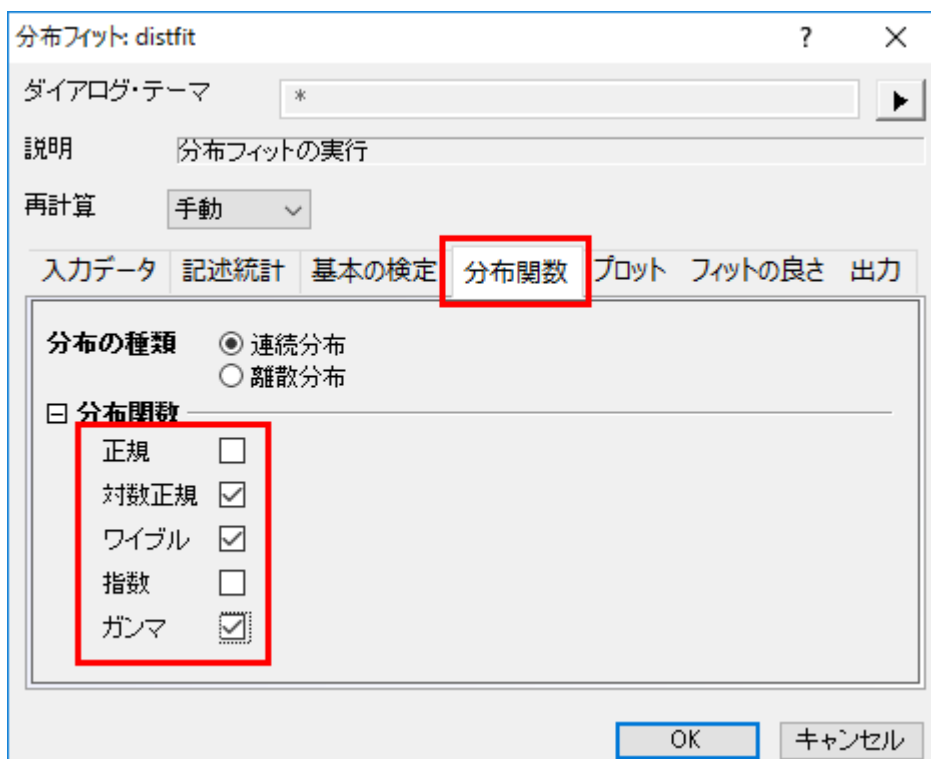
1. 新しいプロジェクトか、新しいワークブックを作成します。\\Samples\Statistics\HouseSold.dat ファイルをインポートします。
2. 列 B を選択し、**作図:2D:ヒストグラム:ヒストグラム** を選びます。



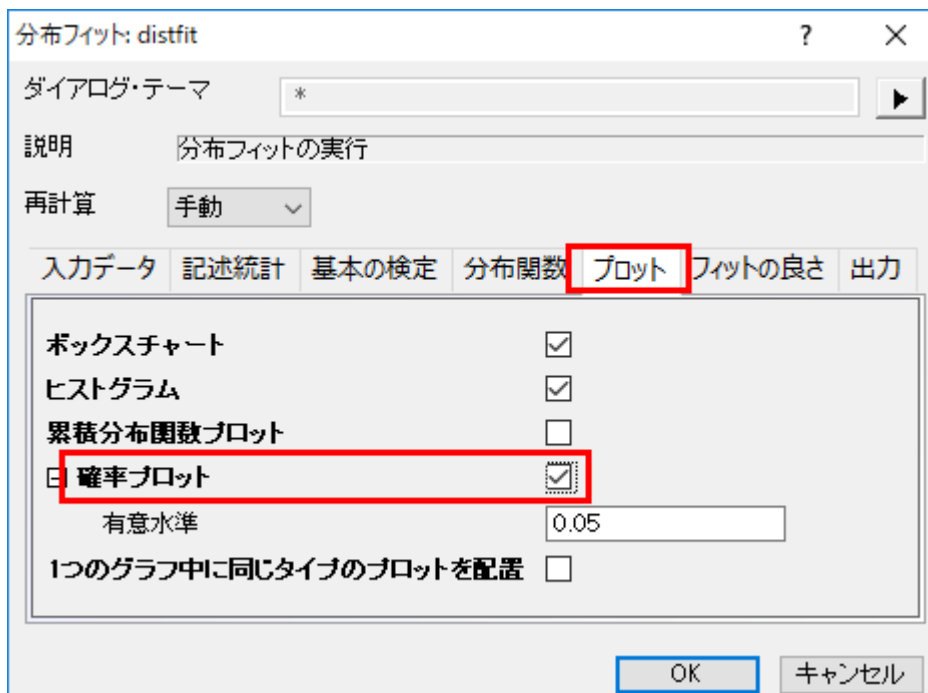
3. 以下の点を踏まえて、分布を選択します。
 - データは自然数でのみ集計されています。つまり、連続分布も離散型分布も使用できます。(小数点を有している数値がある場合、連続分布のみが適用されます。)しかし、通常離散型分布よりも連続分布のほうがよりよいフィットになるため、今回の場合は連続分布を選択します。
 - 売ることが出来た新築物件数は正の数です。正規分布、マイナスの値をとることが出来る分布は考慮する必要はありません。
 - ヒストグラムを見ると、ある特定の値周辺にデータが集まっているようです。つまり、指数分布(データが極端に不均整な場合に使用する分布)を考慮する必要はありません。

分布フィットを実行する

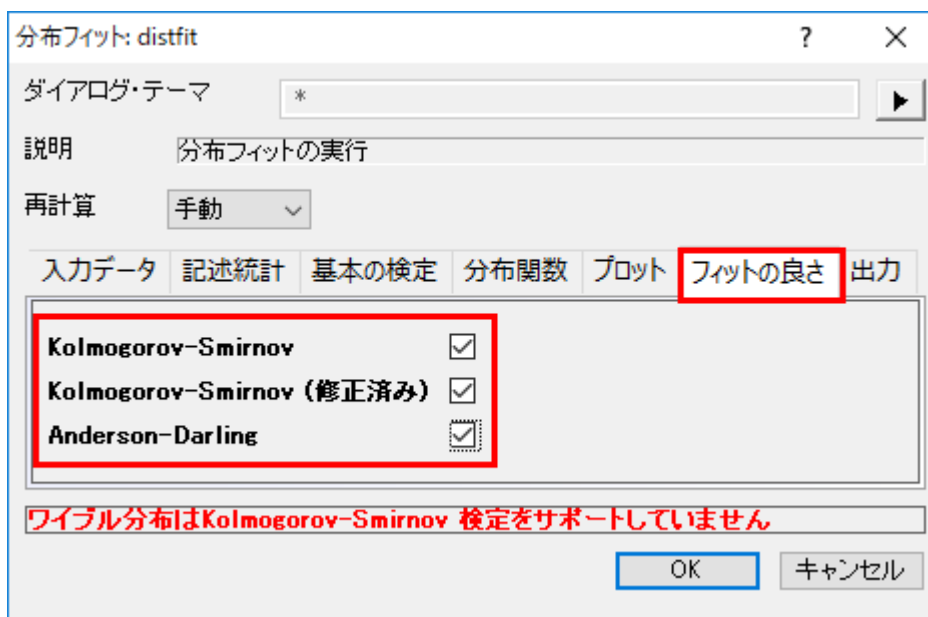
1. **HouseSold** ワークシートに戻ります。列 B を選択して Origin のメニューから、**統計:記述統計量:分布フィット**と操作します。
2. 操作をして開くダイアログで**分布関数**ブランチを開き、**正規**のチェックを外して下図のように3つの分布を選択します。これらの3つの分布は**分布を選択する**の内容と結論を元に決められています。
 - 対数正規
 - ワイブル
 - ガンマ



3. **プロット**ブランチを開き、**確率プロット**を選択します。



4. フィットの良さブランチを開き、3つの手法全てにチェックをつけます。OK をクリックして設定を適用し、ダイアログを閉じます。

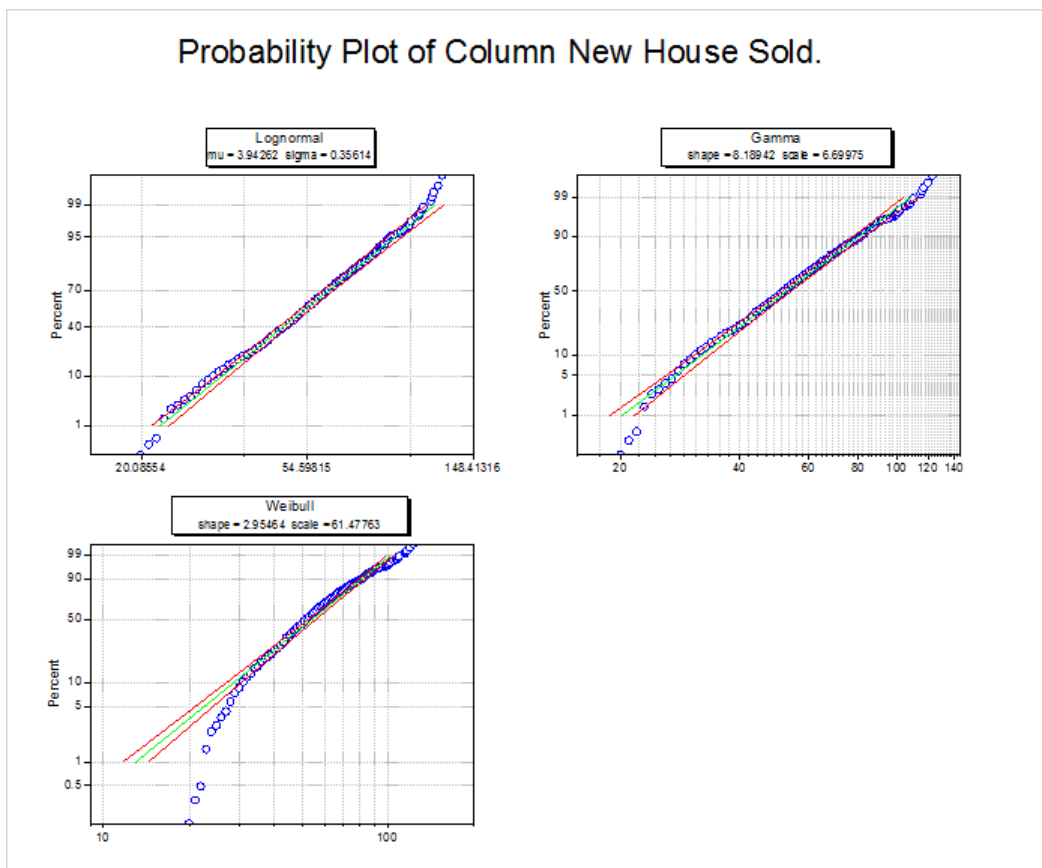


フィットモデルを比較し選択する

フィットモデルは以下の分布フィットの結果を元に比較します。

- 確率(P-P)プロット

参照線に全ての散布図の点が近ければ、その分布がよりデータに適していることを示します。確率プロットでは対数正規分布とガンマ分布がどちらもデータにとってよい分布であるといえそうです。



● **フィットの良さの検定表**

結果の表の中にある P 値を確認します。P 値が 0.05 よりも小さい場合、その分布を 0.05 のレベルで破棄することを意味します。対数正規分布とガンマは、どちらも P 値の値が 0.05 よりも大きいことが**フィットの良さ検定**から分かります。よって、対数正規分布とガンマはどちらもこのデータには良いモデルであるといえます。

□ **フィットの良さの検定**

	分布	フィットの良さの検定	統計	P値	水準(5%)で判定
New House Sold	正規対数	K-S 検定	0.03457	0.45539	対数正規を棄却できません
		修正 K-S 検定	0.03295	0.0998	対数正規を棄却できません
		A-D検定	0.68316	0.07408	対数正規を棄却できません
	ワイブル	修正 K-S 検定	0.06783	<=0.01	ワイブルを棄却する
		A-D検定	4.90331	<0.01	ワイブルを棄却する
	ガンマ	K-S 検定	0.02828	0.74285	ガンマを棄却できません
		修正 K-S 検定	0.02797	>0.25	ガンマを棄却できません
		A-D検定	0.54291	0.18207	ガンマを棄却できません

確率プロットとフィットの良さ検定より、対数正規分布とガンマ分布はこのデータに対してはどちらもよい分布であるといえます。ここでは、対数正規(lognormal)分布を選択してこの後の例題を進めていきます。

推定を行う

最も良い分布モデルが決定したら、CDF と INV 関数を使用して次の確率を計算できます。

- もし、80 軒の家を新築する場合、全てが売れる確率はどれほどになるでしょうか。
- 60%の利益を得る為には、何軒の家を建てればよいでしょうか。

- 最初の質問の答えを探すために、ウィンドウメニューからコマンドウィンドウまたはスクリプトウィンドウを開き、以下のコマンドを入力します。

```
logncdf(80, 3.94262, 0.35614) =
```

ここで 3.94262 は μ で 0.35614 は σ です。どちらもレポートシートのパラメータ推定表から生成された値です。

パラメータ推定		分布	パラメータ	推定	下側 95%	上側 95%
New House Sold	正規対数	mu 位置		3.94262	3.91452	3.97072
		シグマスケール		0.35614	0.33679	0.37661
	ワイブル	アルファスケール		61.47763	59.76193	63.24259
		ベータ形状		2.95464	2.78884	3.1303
	ガンマ	アルファ形状		8.18942	7.34083	9.13611
		シータスケール		6.69975	5.98501	7.49985

- 以下のような結果になります

```
logncdf(80, 3.94262, 0.35614) = 0.89136185728793
```

建築業者が 80 軒の新築物件を建てた場合、約 89%の確率ですべての家が売れないだろう、という事がいえます。

- 2 番目の質問に答えるために、コマンドウィンドウあるいはスクリプトウィンドウで以下のコマンドを実行してください。

```
logninv(1-0.6, 3.94262, 0.35614) =
```

- 以下のような結果になります

```
logninv(1-0.6, 3.94262, 0.35614) = 47.105650533425
```

この結果により、不動産屋は 47 軒の新築物件を建てれば利益を得ることが出来そうである、といえます。



上記の[分布フィットを選択するセクション](#)で対数正規分布を選択したので logncdf と logninv を使用して推定を実行しました。ガンマを選択している場合、gamcdf と gaminv を使用します。ガンマでも、似たような結果を得ることができます。

Notes:他にも、分布フィットの記述統計量や他のグラフで簡単にデータの情報を読み取ることができる箇所があります

- 記述統計表

- 分位数表
- ヒストグラム
- ボックスチャート
- CDF(累積分布関数プロット)



5.1.5. 偏相関係数

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ユーザストーリー](#)
- [4 ピアソンのRで関係性を検出する](#)
- [5 偏相関係数で実際の関係性を明らかにする](#)
- [6 結論](#)

サマリー

偏相関係数は、1 つまたはそれ以上の制御変数の影響を除外した後に、2 つの不規則な変数間の線形な関係性を測定する為のツールです。

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- 実際の例を使った、origin での偏相関の実行方法
- 算出された結果の読み取り方

ユーザストーリー

我々は、2000 年から 2010 年までの、国ごとの 11 の指標(医療費、GDP、人口等)を含んだ公のデータをワールドバンクから入手しました。インターネットの利用、携帯の利用、米国での医療費の関係性を学習します。

ピアソンのRで関係性を検出する

このチュートリアルは、チュートリアルデータプロジェクト(<Origin EXE フォルダ>\Samples\TutorialData.opj)と関連しています。

1. Tutorial Data.opj を開き、Partial Correlation Coefficient フォルダのブック Partial Correlation Coefficient をアクティブにします。
2. ソースデータの Sheet1 をアクティブにします。2000 年から 2010 年までの米国のデータを入力するために、既にデータフィルタを掛けています。
3. Mobile phone subscribers と Total internet users 及び、Health expenditures per capita と GDP per capita の関係性を視覚的に検出するために、まず相関係数ツールは使われます。
 1. Ctrl キーを押して Col(E)、Col(U1)、Col(H) と Col(S)を選択します。
 2. メインメニューの統計:記述統計:相関係数を選択します。
4. 開いたダイアログで、プロットのブランチにある、散布図を選択し、信頼楕円の追加のボックスにチェックを入れます。結果表に有意性を表示するのチェックを外し、有意相関のフラグのボックスにチェックを入れます。

☐ 相関タイプ	
ピアソン	<input checked="" type="checkbox"/>
スピアマン	<input type="checkbox"/>
ケンドール	<input type="checkbox"/>
☐ プロット	
散布図	<input checked="" type="checkbox"/>
信頼楕円の追加	<input checked="" type="checkbox"/>
楕円の信頼水準(%)	95
欠損値を除外	<input checked="" type="radio"/> ペアワイズ <input type="radio"/> リストワイズ
☐ 出力	
結果表に有意性を表示する	<input type="checkbox"/>
有意相関のフラグ	<input checked="" type="checkbox"/>

5. ピアソンの相関係数と散布図行列から、次の内容が分かります。
 3.
 - 散布図データはおおよそ線形になっている。
 - 信頼楕円の形状は細くなっている。
 - 全てのピアソンの相関係数は赤色にフラグされている。
 - 個々のピアソン相関係数は 0.9 よりも大きい。

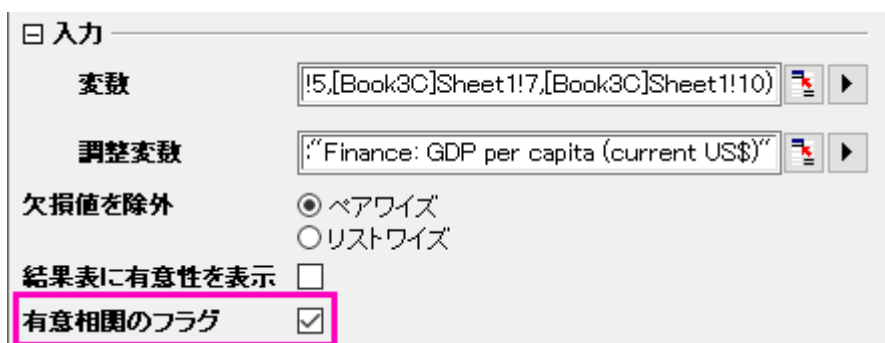
Mobile phone subscribers と Total internet users 及び、Health expenditures per capita と GDP per capita の間には、強い相関性があることが表れている。



偏相関係数で実際の関係性を明らかにする

Mobile phone subscribers と Total internet users 及び、Health expenditures per capita は強く相関していて、GDP per capita もこれら 3 つの値に影響することが分かっています。GDP per capita の影響を除外した後に、3 つの指標の関連性を測定します。

1. ソースデータの Sheet をアクティブにします。Ctrl キーを押しながら、Col(E)、Col(U1)、Col(H) を選択します。
2. メインメニューから統計: 記述統計: 偏相関係数」を選択します。
3. 開いたダイアログで、3 つの選択された列は変数として自動的に選択されています。
4. GDP per capita の影響を除くために、Col(S) を 制御変数 に設定します。Flag Significant Correlations のチェックボックスにチェックを入れます。



5. PCorr1 のシートに移動します。このシートには、GDP per capita の影響を除いた後の、偏相関係数が含まれています。ここから次のことが分かります。
 - Mobile phone subscribers と Health expenditures per capita だけが明らかに関連しています。(Partial Corr の値が赤色にマークされています)しかし、前にピアソンのRで示した時よりも、実際の相関性は強くありません。(偏相関 = 0.87307 対 Pearson の相関 = 0.99157).

- **Mobile phone subscribers** と **Total internet users** の偏相関係数は 0.26178 に減少しています。これらは相関していないことが明らかです。
- **Total internet users** と **Health expenditures per capita** が相関している根拠は示されていません。(Partial Corr = 0.07615), 以前に得たピアソンのRは 0.96685 でした。

	Business: Mobile phone subscribers	total internet user	Health: Health expenditure per capita (current US\$)
偏相関	偏相関	偏相関	偏相関
Business: Mobile phone subscribers	1	0.26178	0.87307
total internet user	0.26178	1	0.07615
Health: Health expenditure per capita (current US\$)	0.87307	0.07615	1

結論

なぜこのように結果が異なるのでしょうか？他の3つの指標間の **GDP per capita** のピアソンのRに着目すると、**GDP per capita** が3つの値に影響していることが分かります。たとえ、**Total internet users** と **Health expenditures per capita** 及び、**Total internet users** と **Mobile phone subscribers** の間に、相関性がなかったとしても、“誤った相関性”は **GDP per capita** の影響により、ピアソンのRによって未だに表れてきます。偏相関係数は、相関する制御変数の影響を無くすことで、2つのファクターの真の関係性について検査する、便利な機能です。統計はさまざまな相互関係の現象が研究される実験のために有用です



5.2. 仮説検定

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
 - [3 ステップ](#)
 - [3.1 Origin で仮説検定を行う](#)
 - [3.2.1 集団の t 検定](#)
 - [3.2.1 素データによる 1 集団の t 検定の実行](#)
 - [3.2.2 要約データによる 1 集団の t 検定の実行](#)
 - [3.3 対応のある集団の t 検定](#)
 - [3.3.1 素データによる対応のある集団の t 検定の実行](#)
 - [3.3.2 要約データによる対応のある集団の t 検定の実行](#)
 - [3.4 独立した 2 集団の t 検定](#)

- [3.4.1 素データによる 2 集団の t 検定の実行](#)
- [3.4.2 要約データによる 2 集団の t 検定の実行](#)
- [3.5 分散の 2 集団の t 検定](#)

サマリー

仮説検定は、標本のパラメータが正しいかどうかを調べたり、2つの標本の特定のパラメータが等しいかどうかを検定するのに使用できます。

パラメトリック法では、標本集団が選ばれた母集団の分布について仮定され、それを元に検定が行われます。通常、正規分布から独立してサンプリングされたデータで行う検定です。

必要な Origin のバージョン: Origin 2016 SR0

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- 実用的なデータから仮説検定を行う
- 算出された結果の読み取り方

ステップ

Origin で仮説検定を行う

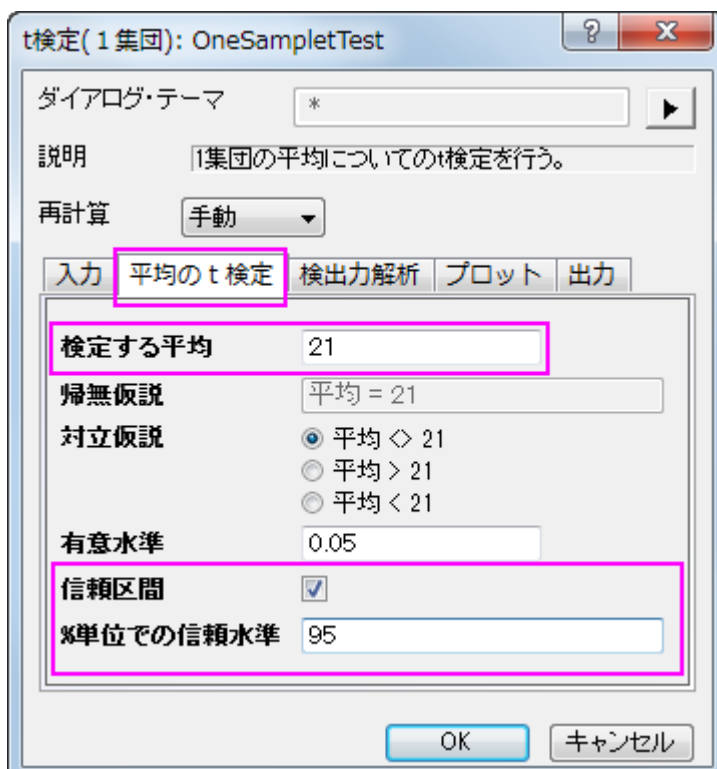
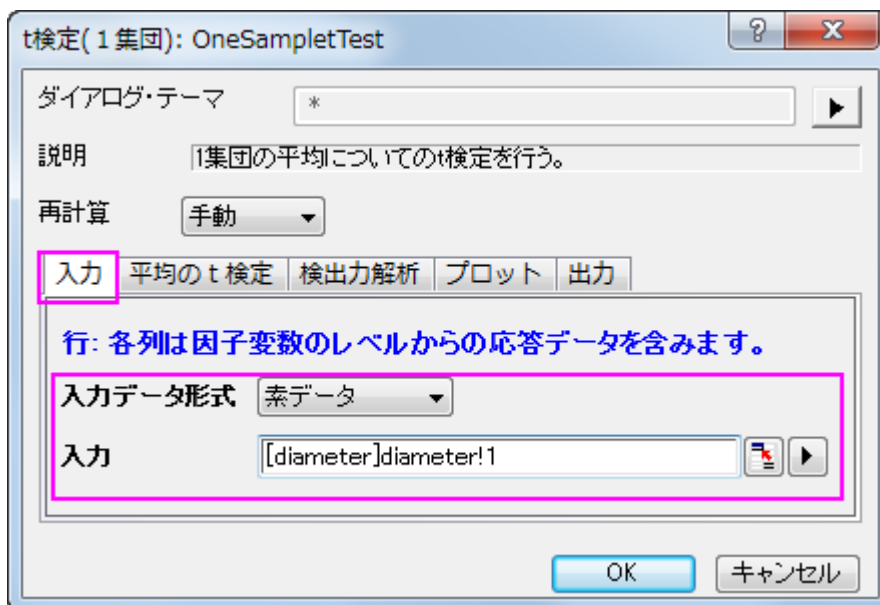
データ型	目的	手法
1 集団	与えられた値と平均の比較	1 集団の t 検定
	与えられた値と分散を比較	1 集団の分散検定
2 集団	平均が等しいか検定する	2 集団の t 検定
	分散が等しいか検定する	2 集団の分散検定
対応集団	平均が等しいか検定する	対応のある t 検定

1 集団の t 検定

素データによる 1 集団の t 検定の実行

製造業者が直径 21mm の高品質なナットを製造するものとして、品質保持部門の担当者が完成品からランダムに 120 個のナットを回収します。それらの直径を計測し、その結果が diameters.dat ファイルです。担当者はこの平均の直径が 21 mm になるか検証したいとしましょう。ナットの直径は過去の記録から正規分布に近い形で分布している事が分かっています。しかし、母集団の標準偏差は分かっています。よって、1 集団の t 検定を次の手順に沿って行います。

1. 新しいワークブックを開き、\Samples\Statistics\diameter.dat ファイルを開きます。
2. メニューから統計:仮説検定:t 検定(1 集団)と選択して OneSampletTest ダイアログを表示します。
3. 入力タブをクリックし、入力データ形式を行にセットします。
4. 入力の右にある矢印ボタンをクリックし、A(X):diameterを選択します。
5. 平均による t 検定をクリックし、検定平均を 21 にします。対立仮説が平均 <> 21 (両サイド検定)に設定されていることを確認し、信頼区間にチェックを入れ、信頼レベル in %を 95 にします。



- デフォルトでは、検定手順は変数の記述統計と仮説検定の結果を表示します。さらに、データに関するヒストグラムの作成と平均の信頼区間も設定できます。
- OK** ボタンをクリックして結果を算出します。

記述統計量の表には、変数に対するサンプルサイズ、平均、標準偏差、標準誤差があります。標本平均である 21.00459 は仮説平均の 21 よりも少し大きいぐらいで、平均値の標準誤差 (SEM) は 0.00156 です。

記述統計				
	N	平均	SD	SEM
"diameter"	100	21.00459	0.0156	0.00156

検定の表から、t 統計量 (2.9437) および関連する p 値 (0.00404) は、ナットの直径の平均が $\alpha=0.05$ のレベルで 21 と有意に異なることを表しています。 \alpha=0.05 \\ \alpha=0.05 \\

検定統計			
	t 統計	DF	Prob> t
"diameter"	2.9437	99	0.00404

帰無仮説: 平均 = 21
 対立仮説: 平均 \neq 21
 "diameter": 有意水準 0.05 では、母集団の平均は検定の平均 (21) と有意に異なります。

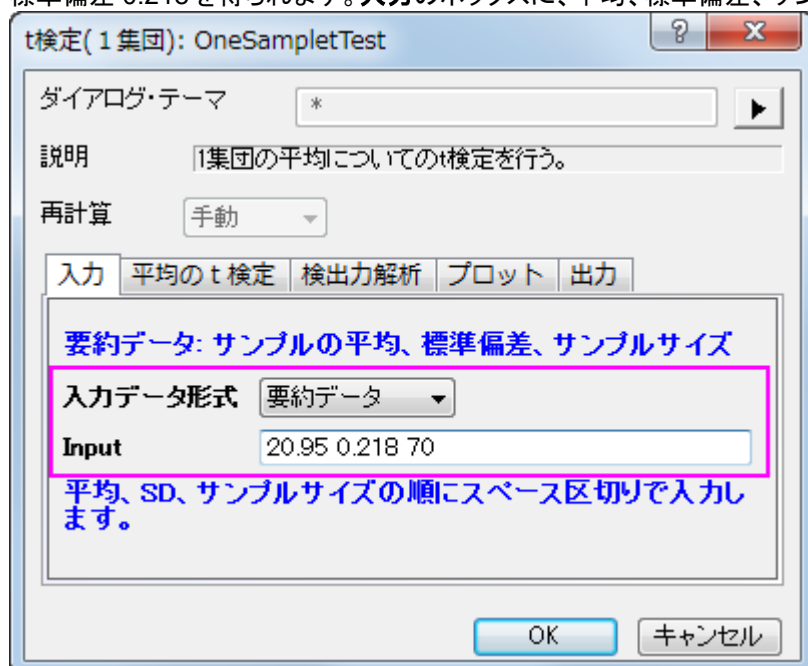
信頼区間は、95% の信頼性で変数の真の平均が区間 [21.0015, 21.00769] 内に含まれることを示しています。

信頼区間: 平均			
	信頼水準 (%)	下限	上限
"diameter"	95	21.0015	21.00769

要約データによる 1 集団の t 検定の実行

要約データによる 1 集団の t 検定を実行するには、**入力タブの入力データの形式を要約データに変更**します。

今回、70 個のナットを検定すると仮定しますので、サンプルサイズは 70 を入力します。計算を進めていくと、平均値 20.95 と標準偏差 0.218 を得られます。**入力のボックスに、平均、標準偏差、サンプルサイズを入力**します。



次に、平均の t 検定タブの検定する平均として 21 を入力します。OK をクリックして実行します。

次のサマリー表が得られ、ここで調査した検定による平均は、母集団の平均と大きく異ならないという結果になります。

検定統計

	統計	DF	Prob> t
要約データ	-1.91895	69	0.05913

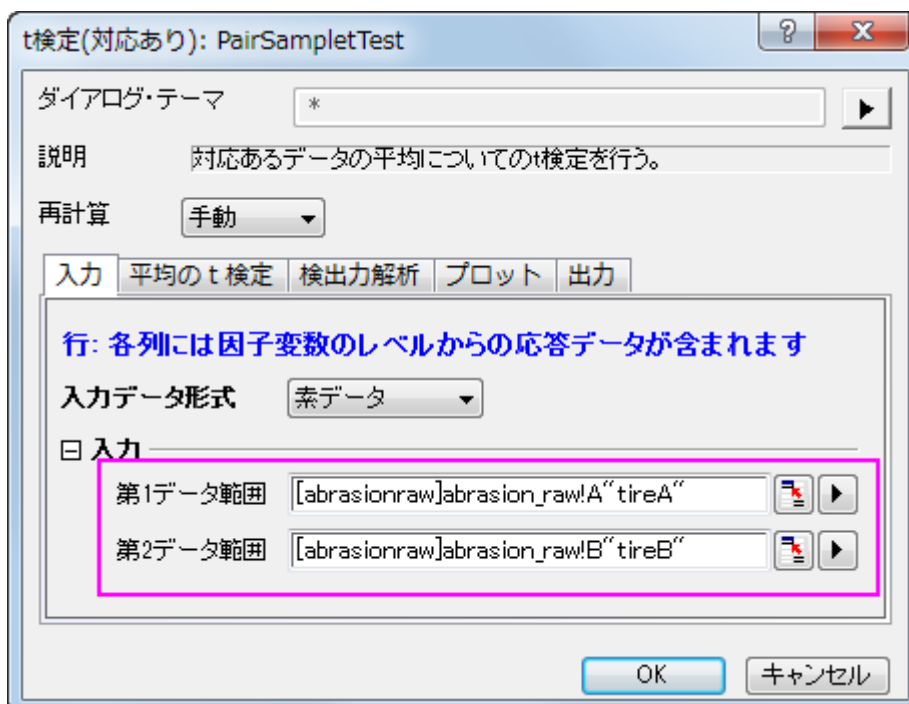
帰無仮説: 平均 = 21
 対立仮説: 平均 <> 21
 L 意水準 0.05 では、母集団の平均は検定の平均(21)と有意に異なりません。

対応のある t 検定

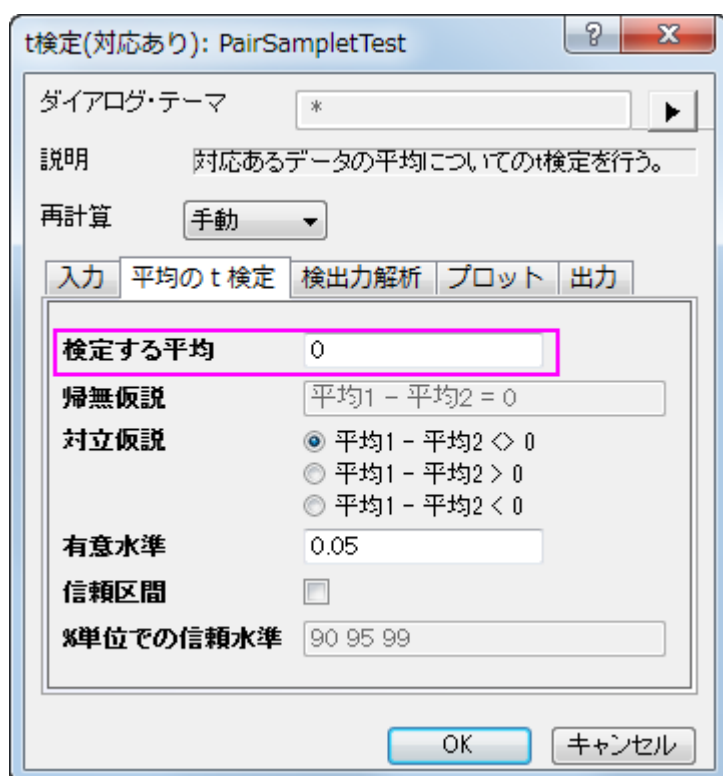
素データによる対応のある t 検定の実行

2 種類のタイヤの耐摩耗性を比較するものとします。2 種類のタイヤから、それぞれ 8 つずつタイヤを抜き取り、8 つのペアにします。各ペアは、2 種類のタイヤから抜き出されたものです。そして、摩耗テストを実施するために 8 つの平面にタイヤを用意し、対応のある t 検定を行うために摩耗データを計測します。

1. 新しいワークブックを開き、\Samples\Statistics\abrasion_raw.dat ファイルを開きます。
2. メニューから統計: 仮説検定: t 検定 (対応あり) を選択し、PairSampletTest ダイアログを表示します。
3. 入力のタブで、第 1 データ範囲を tireA の列、第 2 データ範囲を tireB 列に設定します。



4. 平均の t 検定タブをクリックし、検定する平均に 0 を入力します。



5. 他の設定はデフォルトのまま、OK ボタンを押して結果を生成します。

記述統計				
	N	平均	SD	SEM
"tireA"	8	6145	1366.49709	483.12968
"tireB"	8	5825	1097.46461	388.01233
差	8	320	319.68735	113.02655

検定統計		
統計	DF	Prob> t
2.83119	7	0.02536

帰無仮説: 平均1-平均2 = 0
 対立仮説: 平均1-平均2 < 0
 有意水準0.05では、母集団の平均の差は検定の差(0)と有意に異なります。

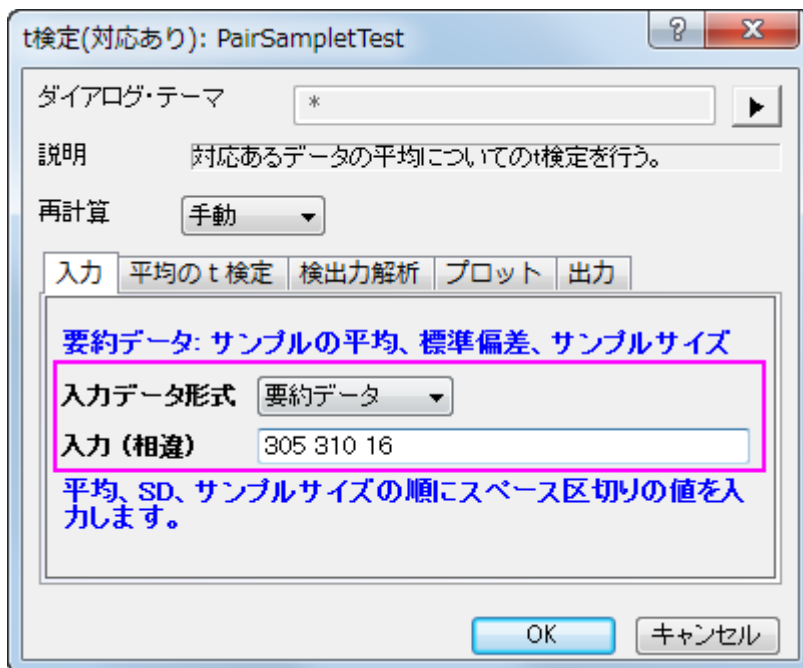
t 検定の表から、t 統計量 (2.83119) およびその p 値 (0.02536) は、2つの平均間の差は有意である、つまり2種類のタイヤは異なる耐摩耗性を持つと示しています。

要約データによる対応のある t 検定の実行

要約データによる対尾のある集団の t 検定の実行

要約データによる対応のある集団の t 検定を実行するには、**入力タブの入力データの形式を要約データに変更**します。

今回、16本のサンプルを検定すると仮定しますので、サンプルサイズは16を入力します。計算を進めていくと、対になっている誤差平均305と、対のデータポイント間誤差の標準偏差310を得られます。(アルゴリズムを参照してください)対応のあるt検定)入力のボックスに、平均、標準偏差、サンプルサイズを入力します。



我々のデータは、 α -レベル 0.05 を下回る 0.0013 の p 値を出力しているの、帰無仮説を排除することが出来ます。

検定統計			
	t統計	DF	Prob> t
要約データ	3.93548	15	0.00132

帰無仮説: 平均 = 0
 対立仮説: 平均 < 0
 注意水準 0.05 では、母集団の平均は検定の平均(0)と有意に異なります。

この検定で、2つの平均値の間の相違は明らかであり、また、2種類のタイヤは異なる耐摩耗性を有していると分かります。

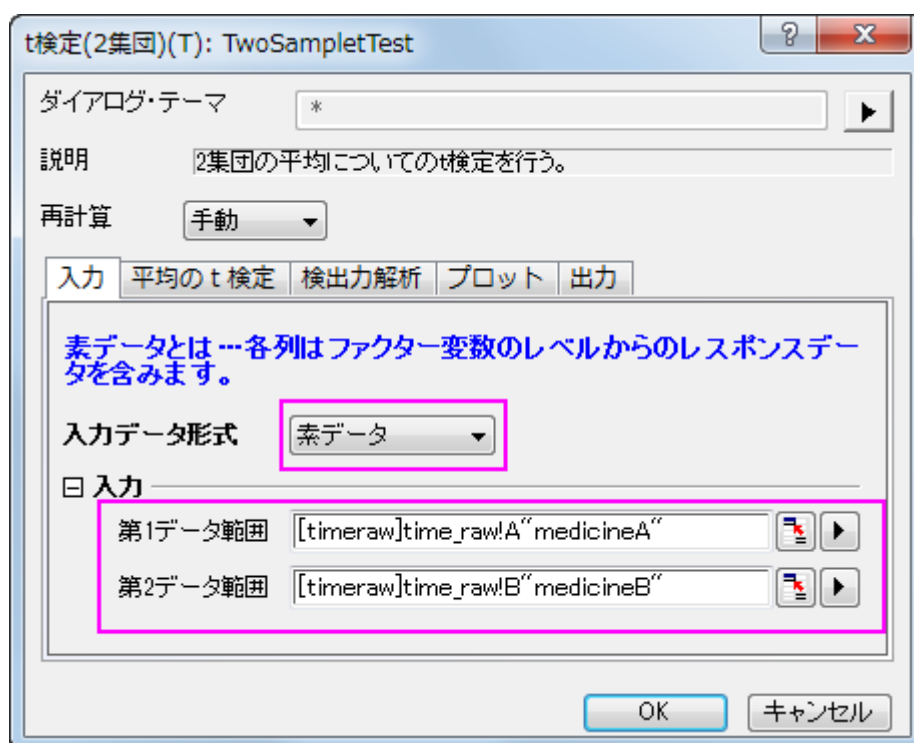
独立した 2 集団の t 検定

素データによる 2 集団の t 検定の実行

ある医師が 2 種類の睡眠薬の効果について調べています。薬の効果を調べるために 20 人の不眠症の患者がランダムに選ばれました。半分は A 薬を、もう半分は B 薬を処方され、薬を飲んだ後の睡眠時間を記録しました。その結果が time_raw.dat ファイルです。

2つの薬が患者に影響があるのか確認するため、独立した 2 集団の t 検定を次の手順で行います。

1. 新しいワークブックを開き、\Samples\Statistics\time_raw.dat ファイルを開きます。
2. メニューから統計: 仮説検定: t 検定 (2 集団) を選択し、TwoSampletTest ダイアログを表示します。
3. 入力データ形式は「素データ」を選択して、列 A の medicineA と列 B の medicineB を 1 番目と 2 番目のデータ範囲としてそれぞれ選択します。



4. 他の設定はデフォルトのまま、OK ボタンを押して結果を生成します。

t 検定の手順は自動的に 2 つの平均の違いを表示します。片方は 2 つの標本の分散は等しいという仮定の元行われ、もう一方は等しくないという仮定で検定されます。この例では、両方の検定は、A 薬と B 薬の間に治療効果の差があるという十分な根拠はないことを示しています。(p 値は 0.0738 と 0.074 なので、どちらも有意レベルである 0.05 よりも大きくなっているためです。)

t検定統計

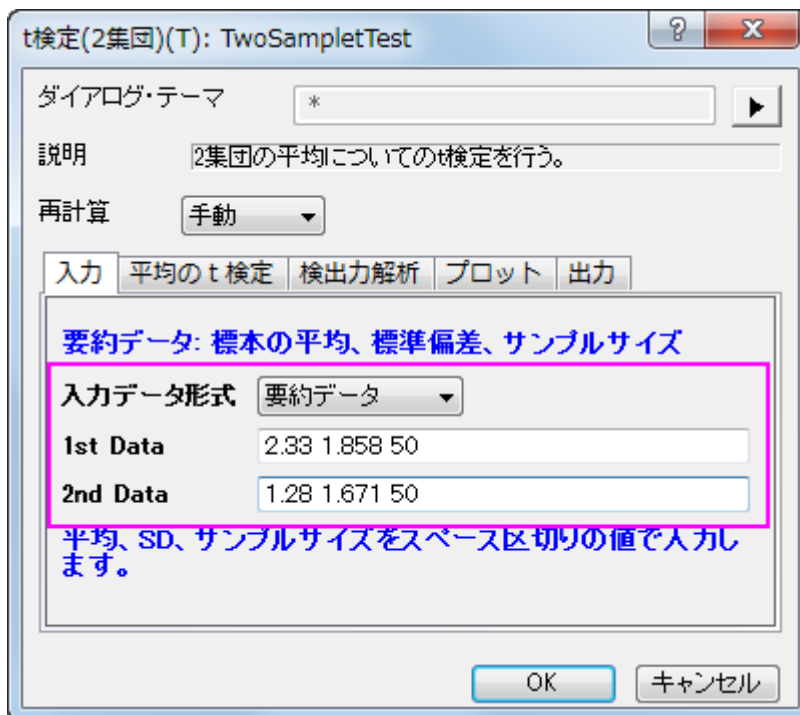
	t統計	DF	Prob> t
等分散を仮定	1.89811	18	0.07384
等分散を仮定しない(Welch検定)	1.89811	17.8248	0.074

帰無仮説: 平均1-平均2 = 0
 対立仮説: 平均1-平均2 <> 0
 有意水準0.05では、等分散を仮定する場合、平均1-平均2は0とは有意な差がありません
 有意水準0.05では、等分散を仮定しない場合、平均1-平均2は0とは有意な差がありません

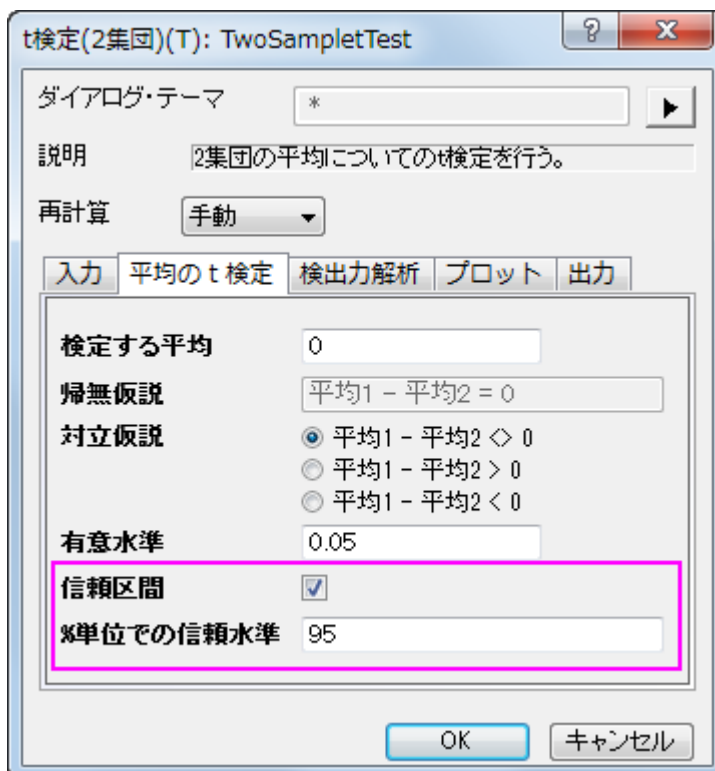
要約データによる 2 集団の t 検定の実行

要約データによる 2 集団の t 検定を実行するには、入力タブの入力データの形式を要約データに変更します。

今回、50 本の患者を検定すると仮定しますので、サンプルサイズは 50 を入力します。計算を進めていくと、1 番目の集団の平均は 2.33、標準偏差は 1.858、2 番目の集団の平均は 1.28、標準偏差は 1.671 と得られます。入力のボックスに、平均、標準偏差、サンプルサイズを入力します。



平均の t 検定タブで、信頼区間のレベルを 95% にしてチェックを入れると、検定するグループ間の違いが計算されます。OK ボタンをクリックして実行します。



我々のデータは、 α -レベル 0.05 を下回る 0.0037 の p 値を出力しているので、帰無仮説を排除することが出来ます。2 つの患者グループの延長睡眠平均は同じではないことがここで分かります。実際に、1 番目の睡眠薬のほうが患者に強い影響を与えると結論付けています。

2 つのグループ間の時間差平均 0.3487 ~ 1.7513 は、95% の信頼性があると、信頼区間は示しています。

t検定統計			
	統計	DF	Prob> t
等分散を仮定	2.97118	98	0.00373
等分散を仮定しない(Welch検定)	2.97118	96.91755	0.00374

帰無仮説: 平均1-平均2 = 0
 対立仮説: 平均1-平均2 <> 0
 有意水準0.05では、等分散を仮定する場合、平均1-平均2は0とは有意な差があります
 有意水準0.05では、等分散を仮定しない場合、平均1-平均2は0とは有意な差があります

信頼区間: 平均			
信頼水準(%)	下限	上限	
95	0.3487	1.7513	



均等な分散と不均等な分散の両方の仮定をサポートしています。この2標本が等しい分散なのか確認するには、メニューから**統計: 仮説検定: 2 集団の分散検定**を選択すれば実行できます。

2 標本の分散検定

1. 続けて新しいワークブックを開き、\Samples\Statistics\time_raw.dat ファイルを開きます。
2. メニューから**統計: 仮説検定: 2 集団の分散検定**を選択し、TwoSampleTestVar ダイアログを表示します。
3. **入力データ形式**は「素データ」を選択して、列 A と列 B を 1 番目と 2 番目のデータ範囲としてそれぞれ選択します。

2集団の分散検定(A): TwoSampleTestVar

ダイアログ・テーマ *

説明 2集団の分散検定を行う。

結果ログの出力

再計算 手動

インデックスデータとは --- ファクター変数とレスポンスデータは 別個の列に格納されます。

素データとは --- 各列はファクター変数のレベルからのレスポンスデータを含みます。

入力データ形式 素データ

日 入力

第1データ範囲 [timeraw]time_raw!A"medicineA"

第2データ範囲 [timeraw]time_raw!B"medicineB"

分散比のF検定

プロット

出力

OK キャンセル

4. 他の設定はデフォルトのまま、OK ボタンを押して結果を生成します。

記述統計				
	N	平均	SD	分散
"medicineA"	10	2.35	1.97611	3.905
"medicineB"	10	0.75	1.78901	3.20056

F値				
	F	DF数	分母自由度	Prob>F
	1.2201	9	9	0.77181

帰無仮説: 分散1/分散2 = 1
 対立仮説: 分散1/分散2 <> 1
 有意水準0.05では、2つの母集団の分散は有意に異なりません。

結果より、p 値=0.77181 >0.05 なので、帰無仮説を棄却出来ない、この 2 集団の分散は有意に異ならないといえます。

5.3. ANOVA

5.3.1. 一元配置の分散分析

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ステップ](#)
 - [3.1 インデックスデータモード](#)
 - [3.2 素データ値モード](#)

サマリー

統計では主にインデックスと素データの 2 つの入力データモードがあります。通常、分析を実行するときにデータセットすべてを使用する必要はありません。そのために Origin はデータを選択する方法をいくつか提供しています。例えば、インタラクティブなデータセレクトボタンを使用して、グラフ上でデータを選択したり、「列ブラウザー」ダイアログを使ってデータを選択できます。

このチュートリアルでは、分散分析(ANOVA)統計検定を使って、これら 2 つの入力データモードを使って分析を実行する方法を学習します。

ANOVA は、いくつかのグループの平均を比較するパラメトリック検定のひとつで、t 検定を拡張したものです。比較する集団が 2 つ以上ある場合には、t 検定は適さない、ANOVA を使用します。例えば、5 つのグループ間の平均を t 検定で比較すると、対ごとに t 検定を行います。それぞれに対して有意水準 0.05 で分析を行うため、誤って帰無仮説を棄却する確率(タイプ I エラーの確率)は $1-(1-0.05)^{10}=0.401$ となってしまいます。同じ条件でも、ANOVA を用いるとタイプ I エラーを犯す確率を 0.05 におさえることができます。

ANOVA は正規性と等分散を必要とします。それ以外の場合、ノンパラメトリック検定を使用します。

必要な Origin のバージョン: Origin 2016 SR0

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- 統計分析ダイアログで異なる入力データモードを使用する方法
- 正規性の検定を実行する
- 一元配置の分散分析を実行

ステップ

Origin は、インデックスとデータの 2 つのモードで ANOVA を計算することができます。

インデックスモードを使うときには、因子とデータの 2 列でデータが構成されている必要があります。

	A(X)	B(Y)
Long Name	plant	nitrogen
Comments	Factor	Data
1	PLANT3	18.15473
2	PLANT3	12.90409
3	PLANT2	18.61197
4	PLANT1	17.7111
5	PLANT4	11.81661
6	PLANT3	11.68327
7	PLANT2	23.43165
8	PLANT2	14.01454

素データモードで行う場合、異なるレベルは異なる列に入力します。

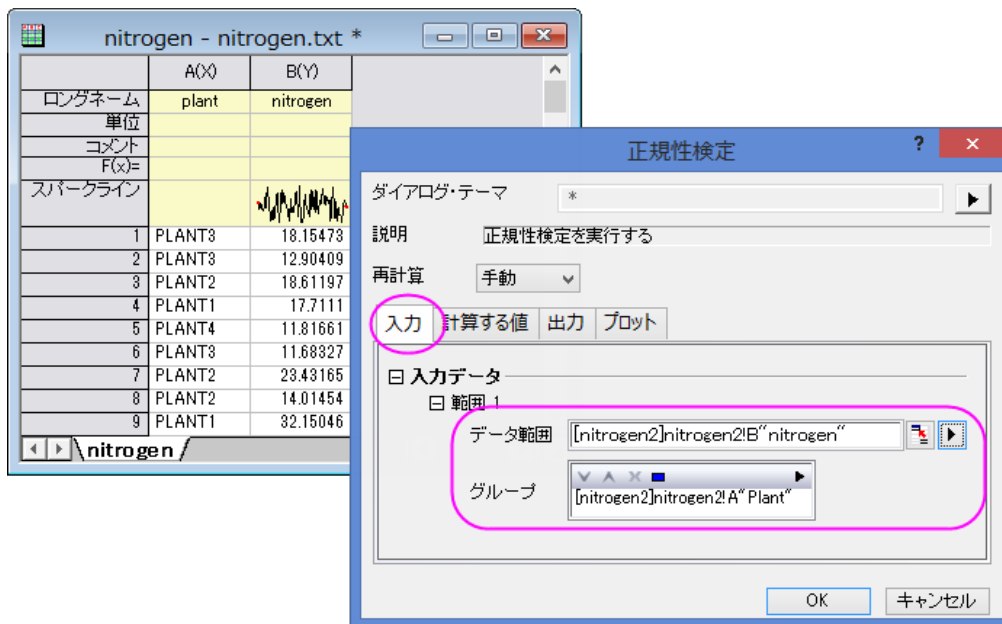
	A(X)	B(Y)	C(Y)	D(Y)
Long Name	Plant1	Plant2	Plant3	Plant4
Comments	Level1	Level2	Level3	Level4
1	17.7111	18.61197	18.15473	11.81661
2	32.15046	23.43165	12.90409	2.39438
3	17.70871	14.01454	11.68327	1.09914
4	28.07729	12.17685	23.52293	16.00756
5	7.83567	4.86902	16.00594	13.85077
6	2.06008	18.93963	3.04056	9.22245
7	22.81923	29.92086	14.29516	14.86523

インデックスモード

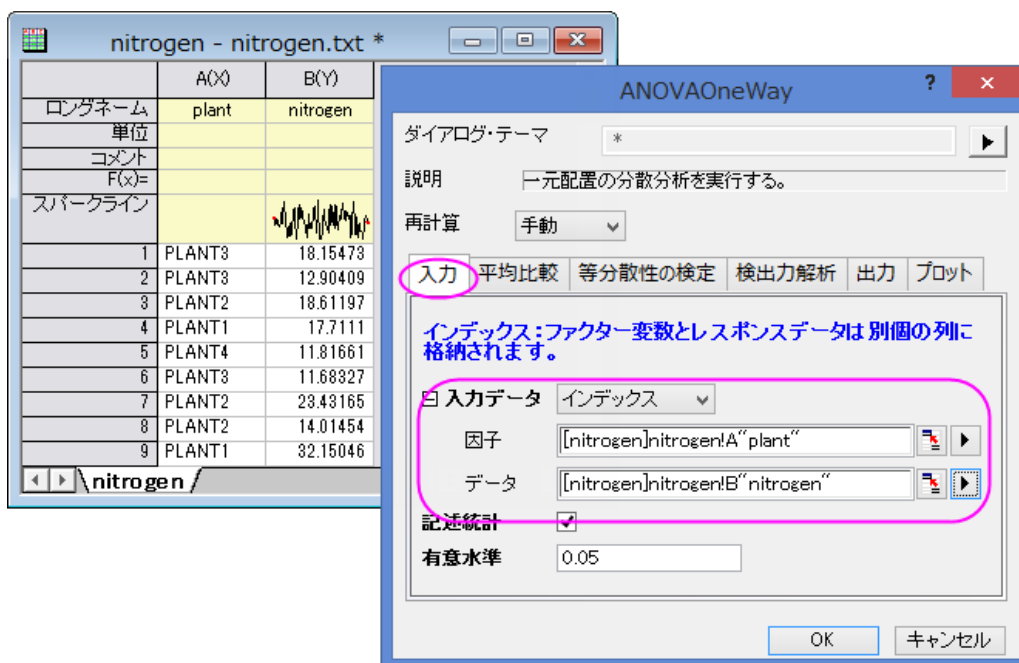
4 種類の植物の窒素の含有量がミリグラム単位で記録されており、植物の種類によって窒素の含有量が異なるかどうかを調査します。このサンプルに対しては、インデックスモードで一元配置 ANOVA を実行します。

1. 新規ワークブックを開きます。メインメニューから**データ:ファイルからインポート:単一 ASCII**と選択し、Samples\Statistics フォルダにある **nitrogen.txt** をダブルクリックして選択します。**Import and Export:impASC** が開いたら、**OK** ボタンをクリックします。

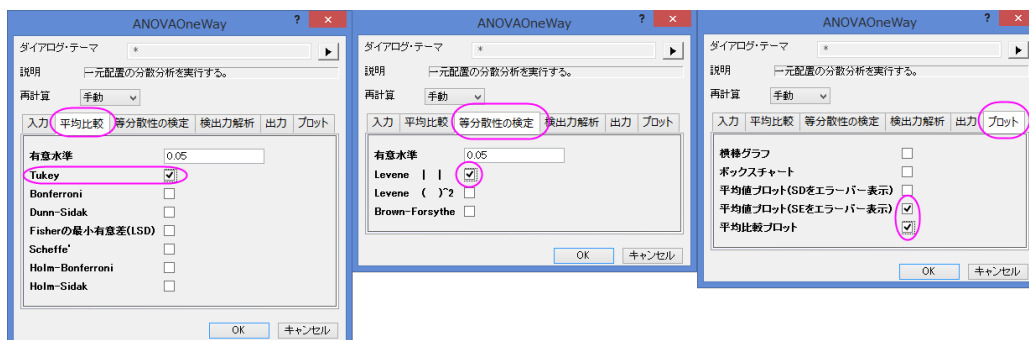
- 最初に、データの各グループに対して正規性の検定を実行し、正規分布に従うかを調べます。ワークブックの一行目を選択し、メインメニューのワークシート:ソート(ワークシート):昇順を選択します。
- メインメニューの統計:記述統計:正規性検定を選択し、正規性検定ダイアログを開きます。正規性検定ダイアログで、入力ノードの範囲 1 ノードを開きます。データ範囲の右にある矢印ボタンをクリックしてコンテキストメニューを表示し、B(Y): nitrogen を選択します。同様に、グループ範囲でもコンテキストメニューから A(X): plant を選択します。OK をクリックします。



- ワークシート **nitrogen** をアクティブにして、メインメニューの統計:ANOVA:一元配置と選択します。**ANOVAOneWay** ダイアログで、入力データモードをインデックスにします。因子の右にある矢印ボタンをクリックし、コンテキストメニューで A(X): plant 列を選択し、同様にデータのコンテキストメニューから B(Y): nitrogen 列を選択します。



5. 平均の比較タブを開き、Tukey にチェックをつけます。等分散性の検定プランチでは、Levene にチェックを付けます。検出力解析では実際の検出力にチェックをつけ、プロットノードを開き、平均値プロット(SE をエラーバー表示)と平均比較プロットにチェックを付けます。OK をクリックします。



結果の解釈

- レポートシート ANOVA1Way にある「等分散性の検定」ノードで結果表を確認します。(ノードを開くと表が表示されます) p 値が 0.05 より大きいので、4 つの集団が等分散していることが分かります。

Levene 検定(絶対偏差)					
	DF	二乗和	二乗平均	F 値	確率 > F
モデル	3	18.06843	6.02281	0.34578	0.79229
誤差	76	1323.76846	17.41801		

検定水準 0.05 で、母分散は有意に異なるとはいえません。

- 全般 ANOVA 表から、4 つのグループのうち少なくとも 2 つは、p 値が 0.05 より小さいので有意差があると結論付けられます。

	DF	二乗和	二乗平均	F値	確率>F
モデル	3	1996.86652	665.45551	12.86214	6.99338E-7
誤差	76	3932.05317	51.73754		
合計	79	5928.41969			

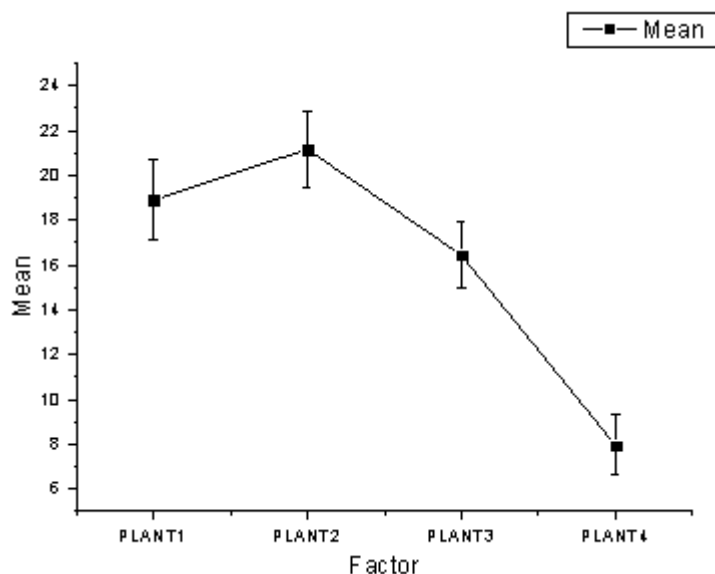
帰無仮説: 全てのレベルの平均は等しい。
 対立仮説: 1つまたはそれ以上のレベルの平均が異なっている。
 信頼水準0.05で、母平均は有意に異なっています。

- より詳しい調査を行うには、「平均比較」ノードを開きます。

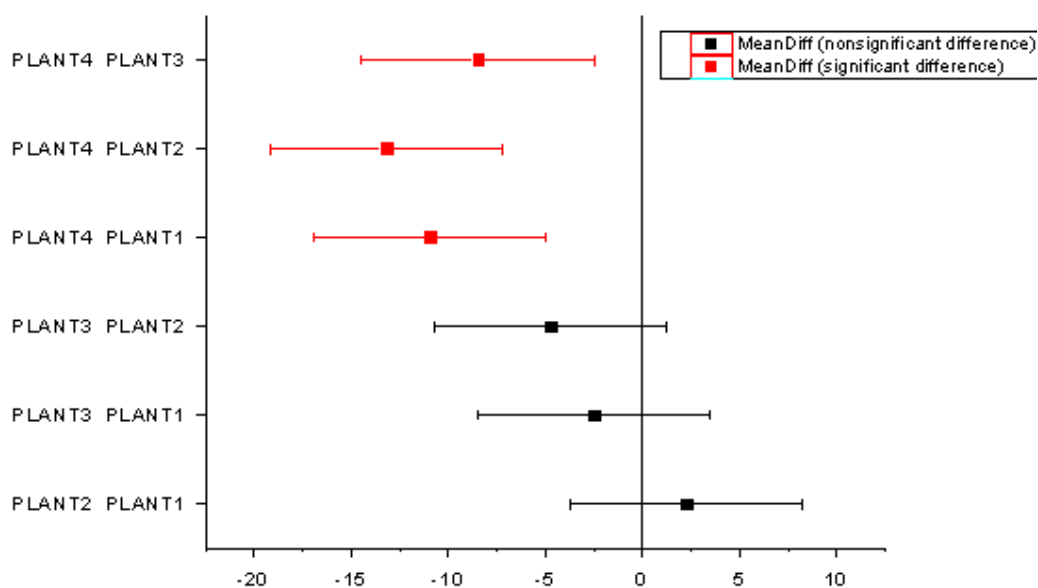
	平均差:	SEM	q値	Prob	Alpha	有意水準	LCL	UCL
PLANT2 PLANT1	2.26308	2.27459	1.40706	0.75274	0.05	0	-3.71181	8.23796
PLANT3 PLANT1	-2.46538	2.27459	1.53284	0.70039	0.05	0	-8.44027	3.5095
PLANT3 PLANT2	-4.72846	2.27459	2.93989	0.16935	0.05	0	-10.70334	1.24643
PLANT4 PLANT1	-10.93833	2.27459	6.80085	4.38499E-5	0.05	1	-16.91322	-4.96345
PLANT4 PLANT2	-13.20141	2.27459	8.20791	8.24355E-7	0.05	1	-19.1763	-7.22653
PLANT4 PLANT3	-8.47295	2.27459	5.26801	0.00207	0.05	1	-14.44784	-2.49807

1は有意水準0.05で平均の差が有意であることを示しています。
 0は有意水準0.05で平均の差が有意ではないことを示しています。

- PLANT4の平均が他の3種類とは大きく異なることが分かります。平均値プロットと平均比較プロットから、PLANT4は他の3つのグループと異なり、最も小さい平均をもつことがわかります。



Means Comparison using Tukey Test



- パワー表で、実際のパワー=0.99976 であることからタイプ II エラーの確率はほぼ 0 であることがわかります。

パワー			
	Alpha	サンプルサイズ	検出力
実際の検出力	0.05	80	0.99976

素データモード

1. 新規ワークブックを開きます。メインメニューから**データ:ファイルからインポート:単一 ASCII**と選択し、Samples\Statistics フォルダにある **nitrogen_raw.txt** をダブルクリックして選択します。**Import and Export:impASC** が開いたら、**OK** ボタンをクリックします。
2. 全ての列を選択し、メニューから**統計:ANOVA:一元配置**と選択します。**ANOVAOneWay** ダイアログで、入力データモードから**素データ値**を選び、**OK** をクリックします。
3. 得られた分析結果を分析すると、**インデックスデータモード**を使用した時と同様の結論が得られたことがわかります。

	A(X)	B(Y)
ロングネーム	Plant1	Plant2
単位		
コメント		
F(x)=		
スパークライン		
1	17.7111	18.61197
2	32.15046	23.43165
3	17.70871	14.01454
4	28.07729	12.17685
5	7.83567	4.86902
6	2.06008	18.93963
7	22.81923	29.92086
8	6.22726	22.32084
9	12.25362	20.46398
10	12.39297	18.93563



レベル名の自動に設定しておくで、選択された列のロングネームが自動的に表示されます。



5.3.2. 一元配置(繰り返し測定)分散分析

サマリー

繰り返しのある一元配置の分散分析は、一元配置の分散分析に似ていますが、繰り返し測定データを前提とした従属変数を扱います。この状況では、繰り返しファクターのレベル間の相関があるので、通常の一元配置の分散分析の独立性の前提は無くなります。

一元配置の分散分析と同様、繰り返しのある一元配置の分散分析は、平均が等しいかどうかを調べるのに使用します。これらの平均は、測定差の平均と異なる対象の平均も含まれます。結果は、それぞれ「対象の影響範囲内での検定(Test of Within-Subjects Effect)」および「対象影響間の検定(Test of Between-Subjects Effect)」という表に表示されます。Originでは、繰り返し測定のあるANOVAにはバランスのとれたサンプルデータ、つまり各レベルで同数の標本数がある必要があります。

必要な Origin のバージョン: Origin 8.6 Pro SR0

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。


- インデックスされたデータを統計分析ダイアログに入力する
- 繰り返しのある一元配置 ANOVA を実行する
- 繰り返しのある一元配置 ANOVA 解析の結果を読みとく

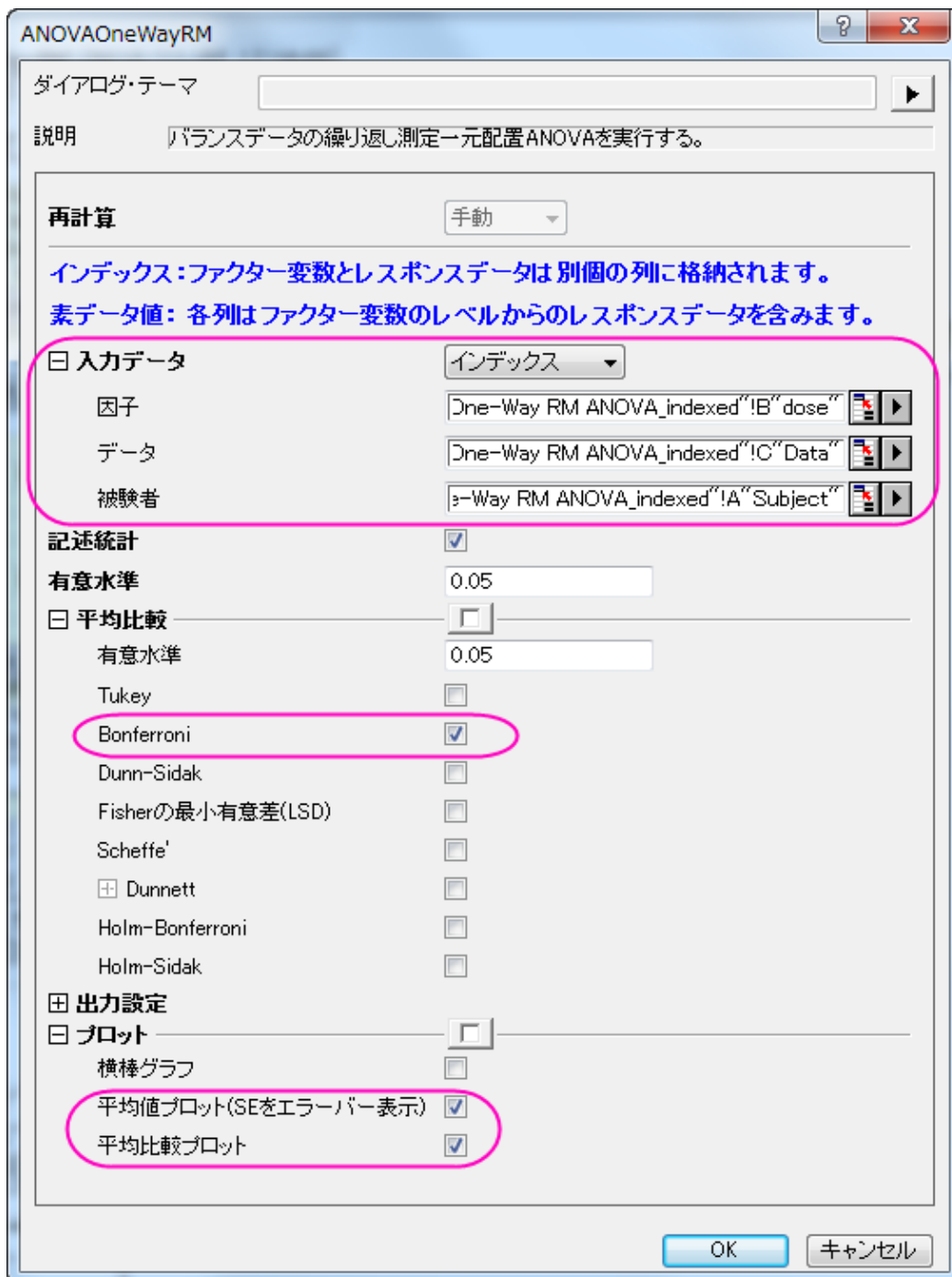
ステップ

Origin はインデックスデータと素データの両方から**繰り返しのある一元配置の ANOVA** を実行できます。**繰り返しのある一元配置の ANOVA** でインデックスデータモードが使用される場合、データは**因子、データ、被験者**の 3 つの列で整理されている必要があります。素データ値モードを使用する場合、異なるレベルは別の列に入力します。

インデックスモード

データは 3 つの異なる用量を用いて 20 の被験者から得た計測結果を含んでいます。これから確認したいのは異なる用量を与えた被験者に対して異なる効果を得られたかどうかです。これを検証するには繰り返しのあるインデックスデータモードの一元配置 ANOVA を使用して実行します。

1. **単一 ASCII インポートボタン**  をクリックして、\Samples\Statistics\ANOVA フォルダにある **One Way_RM_ANOVA_indexed.dat** ファイルをインポートします。
2. **統計: ANOVA: 一元配置(繰り返し測定)** を選択し、ダイアログを開きます。
3. **入力データ** ドロップダウンリストから **インデックス** を選択します。
4. **因子、データ、被験者** にそれぞれ **B(dose)**, **C(Data)**, **A(Subject)** を選択します。
5. **平均比較** のブランチを開き、**Bonferroni** のチェックを付けて Bonferroni 検定を有効にします。
6. **プロット** ブランチを開き、**平均値をプロット(SE をエラーバー表示)** と **平均比較プロット** にチェックを付けます。
7. **OK** ボタンをクリックして、分析を実行します。



結果の読み取り

ANOVAOneWayRM1 ワークシートを開き、分析結果の表を開きます。

繰り返しのある一元配置 ANOVA の結果の読み取りについての詳細は、このヘルプファイルを参照してください。

多変量検定		値	F	数:	DF	確率>F
dose	Pillaiのトレース	0.17777	3.02689	2	28	0.06455
	Wilksのラムダ	0.82223	3.02689	2	28	0.06455
	Hotellingのトレース	0.21621	3.02689	2	28	0.06455
	Royの最大根	0.21621	3.02689	2	28	0.06455

Origin は繰り返しのある観測結果と共に MANOVA (多変量分散分析)の出力を行い、繰り返し効果を検出しようとします。4つの異なる手法(Pillai のトレース, Wilks のラムダ, Hotelling のトレース, Roy の最大根)では、まったく同じ F 検定値と確率、**P=0.06455** を算出するので、3つのレベル変化による平均は統計的に優位に異なる、という事ができます。以下の繰り返しのある分散分析のレポートによると、結論は保守的であるといえます。

Mauchlyの球面性検定						
	MauchlyのW	近似カイ二乗	DF	Prob>カイ二乗	Greenhouse-Geisserのエプシロン	Huynh-Feldtのエプシロン
dose	0.94397	1.61448	2	0.44609	0.94694	1
						0.5

この表は Mauchly 球面性検定の結果を表示します。検定結果から、球面性は維持されている事がわかります。ここで探している値は、Mauchly検定が有意水準にある事をしめす、確率がカイ二乗より大きい(Prob > ChiSq)値なので、この例の中では有意水準 1 (0.44609) は 0.05 よりも大きい事を示します。つまり、球面性の仮定は棄却できないことを示します。

被験者内要因の検定						
		二乗和	DF	二乗平均	F	確率>F
dose	球面性の仮定	0.4473	2	0.22365	3.43018	0.03908
	Greenhouse-Geisser	0.4473	1.89389	0.23618	3.43018	0.04187
	Huynh-Feldt	0.4473	2	0.22365	3.43018	0.03908
	下限	0.4473	1	0.4473	3.43018	0.03908
誤差(dose)	球面性の仮定	3.78162	58	0.0652		0.5
	Greenhouse-Geisser	3.78162	54.92273	0.0688		0.5
	Huynh-Feldt	3.78162	58	0.0652	1	0.5
	下限	3.78162	29	0.1304	1	0.5

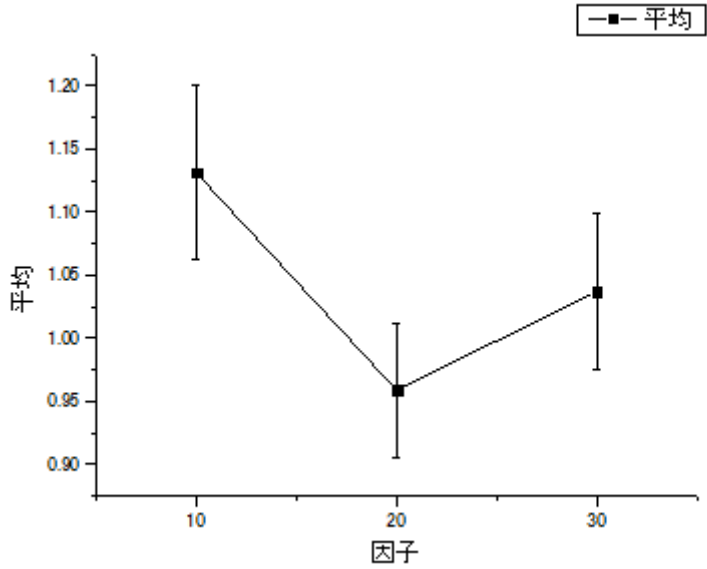
この表からは因子についての F 値と共に、その値の有意水準と効果サイズを得る事ができます。データが球面性を持つという仮定に則っているので、**球面性を仮定して行われた繰り返しのある一元配置 ANOVA** から得た結果は、これら 3つの条件のもとで得られた平均は統計的に有に異なる(P = 0.03908 < 0.05 より)、という事です。言い換えると、dose(用量)は有意要因である、といえます。

記述統計				
	平均	標準誤差	95% LCL	95% UCL
10	1.1312	0.06875	0.99059	1.27181
20	0.95877	0.05324	0.84988	1.06765
30	1.03693	0.06119	0.91178	1.16207

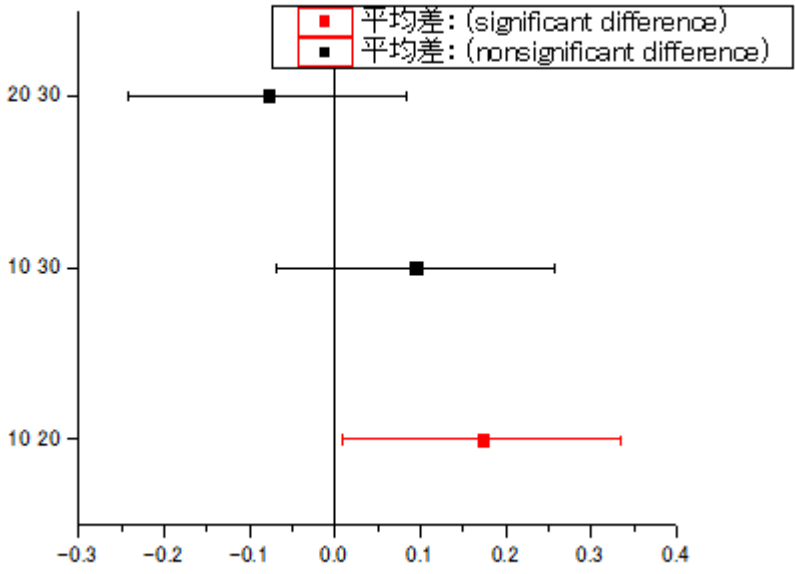
対比較											
Bonferroni検定											
	行番号	平均差	標準誤差	DF	t 値	Prob> t	Alpha	有意度フラグ	95% LCL	95% UCL	
	10 20	0	0.17243	0.06593	58	2.61548	0.03402	0.05	1	0.00989	0.33498
	10 30	1	0.09427	0.06593	58	1.42989	0.47434	0.05	0	-0.06827	0.25681
	20 30	2	-0.07816	0.06593	58	1.18554	0.72192	0.05	0	-0.2407	0.08438

先の表で提示された結果では、平均間では全体的に有意差はありましたが、これらの差がどこから来たのかわかりません。この表は Bonferroni 検定の結果を表示します。これにより、どの平均が異なっていたのを見る事ができます。この場合、dose1 と dose2 の平均は有意に異なっていたといえます(P = 0.03402 < 0.05、有意度 p フラグ=1 より)。

以下の 2つのプロットからも同じような結論を導き出すことができます。



平均比較は Bonferroni検定 を使用



5.3.3. 二元配置分散分析

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ステップ](#)
 - [3.1 インデックスデータモード](#)
 - [3.1.1 2元配置 ANOVA を実行](#)
 - [3.1.2 結果の解釈](#)
 - [3.1.3 相互作用プロット](#)
 - [3.1.4 再計算](#)
 - [3.2 素データ値モード](#)

サマリー

いくつかのケースでは、2つの因子(カテゴリ変数)と連続的な結果変数間の関係を調べたいことがあります。1要因での変化の結果への影響は、他の因子のレベルに依存する可能性があるため、2つの要因間の相互作用を考慮する必要があります。二元配置 ANOVA は、2つの要因の主要な影響とそれらの交互作用を分析するための適切な方法です。

必要な Origin のバージョン: Origin 2016 SR0

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- 二元配置 ANOVA を実行する
- 二元配置 ANOVA の結果の解釈
- 相互作用プロットを作成

ステップ

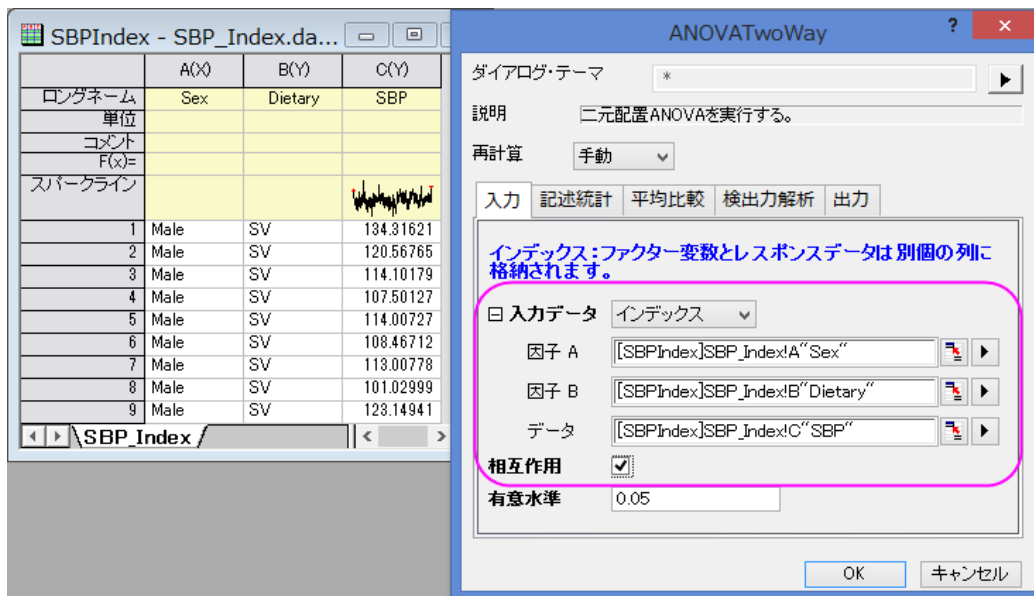
研究者は、性別と食物グループの最高血圧(SBP)における効果に興味を持っています。因子"dietary group"(食物グループ)には、3つのグループがあり、どんな動物性の食物も摂取しない厳格なベジタリアン(SV)、動物性食品の中でも乳製品は食べるラクトベジタリアン(LV)、普通のアメリカの食事を摂るノーマル(NOR)に分けられます。性別と食物グループは独立、またはお互いに相互作用があるかもしれません。この問題を解く方法の一つとして、平均 SBP レベルを予測する二元配置 ANOVA モデルを構築する方法があります。

インデックスデータモード

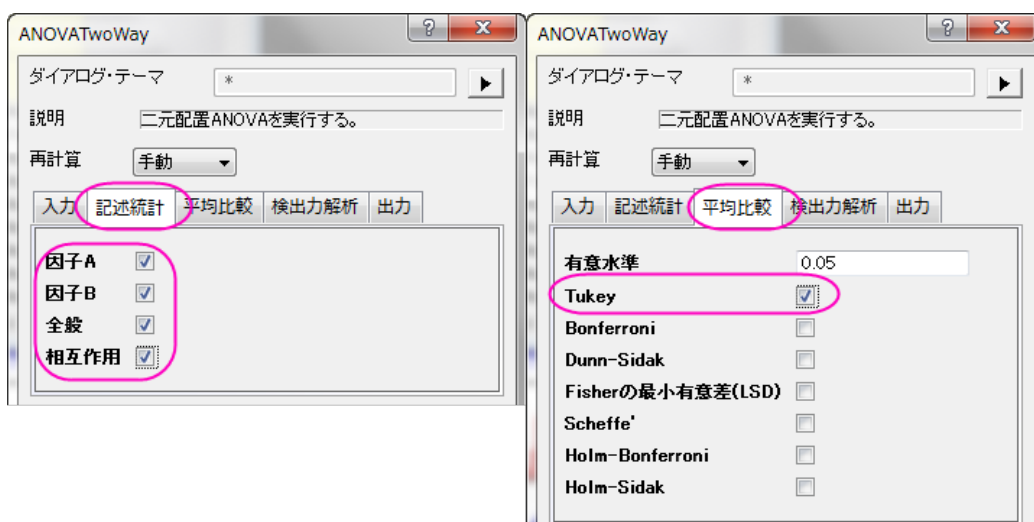
二元配置 ANOVA を実行する

1. 新しいワークブックを開き、`\Samples\Statistics\SBP_Index.dat` ファイルを開きます。

- メニューから**統計:ANOVA:二元配置**と選択して **ANOVAtwoWay** ダイアログを開き、入力データをインデックスに設定します。
- A、B、C 列をそれぞれ**因子 A**、**因子 B**、**データ**に設定します。**相互作用**のボックスにチェックを入れます。



- 記述統計では全てのボックスにチェックを入れます。
- 平均比較の項目の「+」をクリックして項目を開き、**有意水準**を 0.05 にし、**Tukey** のボックスにチェックを付け、これを比較手法とします。



- OK** ボタンをクリックして二元配置 ANOVA を実行します。

結果の解釈

全般ANOVA					
	DF	二乗和	二乗平均	F値	P値
Sex	1	1594.39725	1594.39725	17.64529	4.05551E-5
Dietary	2	1137.86004	568.93002	6.29638	0.00224
相互作用	2	245.48621	122.7431	1.3584	0.2595
モデル	5	2794.86329	558.97266	6.18618	2.40633E-5
誤差	194	17529.50212	90.35826	--	--
修正和	199	20324.36541	--	--	--

有意水準0.05では、**Sex**の母集団の平均は有意に異なります。
 有意水準0.05では、**Dietary**の母集団の平均は有意に異なります。
 検定水準0.05で、**Sex**と**Dietary**の相互作用は有意ではありません。

二元配置 ANOVA の結果シートにある「全般 ANOVA」表から、**Dietary** と **Sex** は両方とも有意な要因であるが、それらの間の相互作用は有意ではないことが読み取れます。**Sex** と **Dietary** の両方の主効果が有意であることを意味し、**Dietary** の変化による結果の影響は、**Sex** のレベルには依存しないということを示します。

相互作用グラフ


さらに相互作用を検出するために、「相互作用プロット」を以下の手順で作成します。

1. タイトル「相互作用」で右クリックして、新しいシートとしてコピーを作成を選択します。

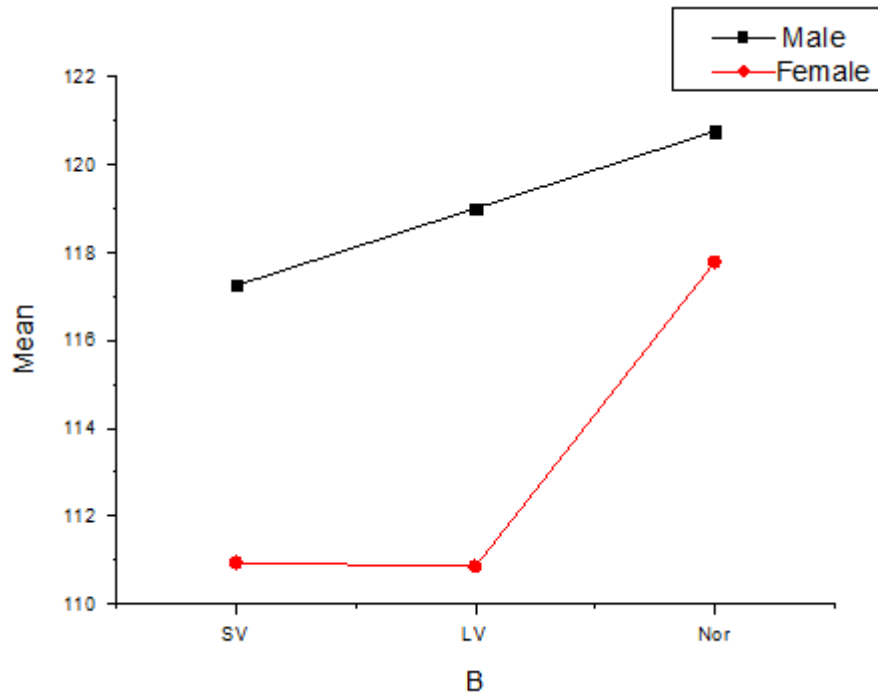
相互作用			
	分散	欠損値	欠損値なし
Ma	113.04092	0	30
	72.13771	0	25
	77.87808	0	45
Fema	107.69851	0	25
	91.7319	0	30
	87.4633	0	45

2. 作成されたシートを開きます。列 B を選択して、フライアウトメニューから、カテゴリとして設定を選択します。
3. D 列を最初の 3 つのセルを選択し、その後 **Ctrl** キーを押しながら、D 列の他の 3 つのセルを選択します。

A(X1)	B(X2)	C(Y2)	D(Y2)	E(yEr?)	F(yEr?)
		N	Mean	SD	SEM
Male	SV	30	117.24744	10.63207	1.94114
Male	LV	25	119.01081	8.49339	1.69868
Male	Nor	45	120.76882	8.82486	1.31553
Female	SV	25	110.93646	10.37779	2.07556
Female	LV	30	110.85397	9.57768	1.74864
Female	Nor	45	117.78078	9.35218	1.39414

4. 2D グラフギャラリーツールバーの  ボタンをクリックし、プロットを作成します。
5. グラフ凡例を右クリックして、コンテキストメニューからオブジェクトの表示属性を選択します。オブジェクトプロパティダイアログで、下図のようにテキストを入力します。OK ボタンをクリックして、ダイアログを閉じます。2 つの要因間の相互作用を示す相互作用グラフが作成されました。

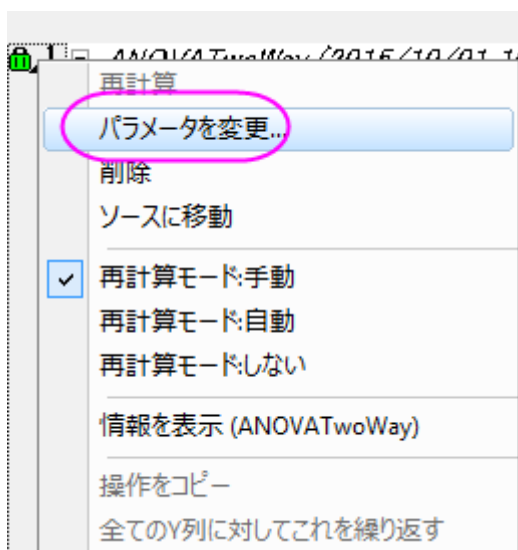
\1(1) Male
 \1(2) Female



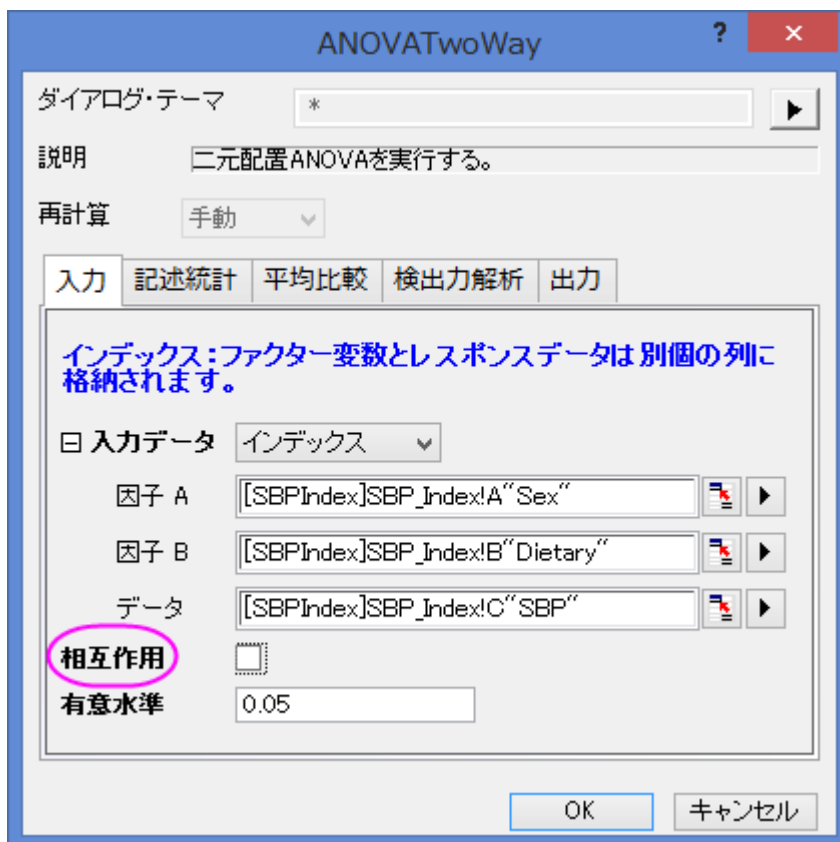
グラフ内のデータポイントによると、**Sex** と **Dietary** 間の相互作用は弱いことが分かります、そのため、相互作用を除いた2つの因子の影響を再計算します。

再計算

1. **再計算 ANOVA2Way1** ワークシートの緑の鍵のアイコンをクリックして、**パラメータを変更**を選択し、ダイアログを再度開きます。



1. ダイアログで、**相互作用**のボックスのチェックを外し、**OK** ボタンをクリックします。



「全般 ANOVA 表」により、**Dietary** と **Sex** は有意な因子であることがわかります。平均比較の表から因子 **Dietary** では、Nor の平均は LV と SV の平均により有意に大きく、男性の平均は女性のものより有意に大きいことがわかります。

	DF	二乗和	二乗平均	F値	P値
Sex	1	1405.79986	1405.79986	15.50138	1.14502E-4
Dietary	2	1154.79872	577.39936	6.36689	0.00209
モデル	3	2549.37708	849.79236	9.37043	8.11226E-6
誤差	196	17774.98833	90.68872	--	--
修正和	199	20324.36541	--	--	--

有意水準0.05では、**Sex**の母集団の平均は有意に異なります。
有意水準0.05では、**Dietary**の母集団の平均は有意に異なります。

		平均差:	SEM	q値	Prob	Alpha	有意水準	LCL	UCL
Sex									
Female	Male	-5.28125	1.34676	5.54574	1.21684E-4	0.05	1	-7.93726	-2.62524
Dietary									
LV	SV	0.18281	1.81598	0.14237	0.99443	0.05	0	-4.1059	4.47152
Nor	SV	4.89599	1.62989	4.24812	0.00843	0.05	1	1.04675	8.74522
Nor	LV	4.71318	1.62989	4.0895	0.01182	0.05	1	0.86394	8.56241

1は有意水準0.05で平均の差が有意であることを示しています。
0は有意水準0.05で平均の差が有意ではないことを示しています。

素データモード

1. 新しいワークブックを開き、\Samples\Statistics\SBP_Raw.dat ファイルを開きます。
2. ワークシートのすべての列を選択し、統計:ANOVA:二元配置を選択すると、ANOVA2Way ダイアログボックスが開きます。入力タブにて、入力データのモードを素データ値を選びます。
3. 因子 A のレベルの数を 2 とし、名前入力のボックスに Sex、Male、Female と入力します。
4. 因子 B のレベルの数を 3 とし、名前入力のボックスにそれぞれ Dietary Group、SV、LV、Nor と入力します。

The screenshot shows the ANOVA2Way dialog box with the following settings:

- ダイアログ・テーマ: *
- 説明: 二元配置ANOVAを実行する。
- 再計算: 手動
- 入力: 記述統計 | 平均比較 | 検出力解析 | 出力
- 素データ値: 各列はファクター変数のレベルからのレスポンスデータを含みます。
- 日入力データ: 素データ値
- 日因子 A:
 - 名前: Sex
 - 日レベルの数: 2
 - レベル1 名前: Male
 - レベル2 名前: Female
- 日因子 B:
 - 名前: Dietary Group
 - 日レベルの数: 3
 - レベル1 名前: SV
 - レベル2 名前: LV
 - レベル3 名前: Nor
- 日データ: --
- 日 Male:
 - SV: [SBPRaw]SBP_Raw\A"A"
 - LV: [SBPRaw]SBP_Raw\B"B"
 - Nor: [SBPRaw]SBP_Raw\C"C"
- 日 Female:
 - SV: [SBPRaw]SBP_Raw\D"D"
 - LV: [SBPRaw]SBP_Raw\E"E"
 - Nor: [SBPRaw]SBP_Raw\F"F"
- 相互作用:

5. 平均比較の項目の「+」をクリックして項目を開き、有意水準を 0.05 にし、Tukey のボックスにチェックを付け、これを比較手法とします。
6. OK ボタンをクリックして二元配置 ANOVA を実行します。

5.3.4. 二元配置(繰り返し測定)分散分析

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ステップ](#)
 - [3.1 素データ値モード](#)
 - [3.2 結果の読み解き](#)

サマリー

繰り返しのある二元配置分散分析の、「二元配置」は実験に2つの要因がある、例えば別々の治療と別々の状態を示します。「繰り返しのある」は同じ被験者が1つ以上の治療もしくは1つ以上の状態が適用されたことを示しています。二元配置の分散分析と同様、繰り返しのある二元配置の分散分析は、因子内の因子レベル平均間の有意差や因子間の交互作用の検定を行います。一般的な分散分析を使うのが適さないのは、繰り返しのある観測に対しての相関のモデリングを行う事ができないからです。また、データが分散分析の仮定である独立性を侵害しているので、使用できません。繰り返しのある二元配置の分散分析のデザインとして、2つの繰り返しのある観測因子でも可能ですし、1つの繰り返しのある観測因子と1つの繰り返しの無い因子の組み合わせでも行えます。繰り返す因子が存在する場合、繰り返しのある分散分析を使用する必要があります。

以下のサンプルでは2つの因子は繰り返しがある因子です。

必要な Origin のバージョン: Origin 8.6 Pro SR0

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。


- 素データを統計分析ダイアログに入力する
- 繰り返しのある二元配置 ANOVA を実行する
- 繰り返しのある二元配置 ANOVA 解析の結果を読みとく

ステップ

Origin はインデックスデータと素データの両方から**繰り返しのある二元配置の ANOVA** を実行できます。**繰り返しのある二元配置の ANOVA** でインデックスデータモードが使用される場合、データは**因子 A、因子 B、データ、被験者**の4つの列で整理されている必要があります。素データモードを使用する場合、異なるレベルと因子は別の列に入力します。

このサンプルでは、異なる薬が被験者に別々の影響を与えるのか調査するのが目的です。**繰り返しのある二元配置の ANOVA** を行う事で、薬の種類と用量が被験者に有意な影響を与えているか検証します。有意な違いがある場合、ペアワイズ比較を行ってどのレベルの影響が異なるのか検証します。

素データモード

1. **単一 ASCII インポートボタン**  をクリックして、\Samples\Statistics\ANOVA フォルダにある **Two-Way_RM_ANOVA_raw.dat** ファイルをインポートします。

2. **統計: ANOVA: 統計: ANOVA: 二元配置(繰り返し測定)**を選択し、ダイアログを開きます。
3. **入力データ**ドロップダウンリストから**素データ値**を選択します。
4. この例では2つの因子があります。**因子 A**と**因子 B**のレベルの数に、それぞれドロップダウンリストから3と2をセレクトします。それぞれ、drug と dose と名前を付けます。

Note: **因子 A**と**因子 B**は繰り返しのある因子であるとデフォルトで設定されています(**因子ブランチ内の繰り返し**にチェックが付いています)。もし片方の因子が繰り返しが無い因子である場合、**繰り返しのチェック**を外せば設定できます。

5. **データブランチ**には、3つのサブグループがあります。**因子 A レベル 1**グループの**因子 B レベル 1**では、入力データ列に列 **d1d1** を選択します。
6. 同様に、**d1d2**, **d2d1**, **d2d2**, **d3d1**, **d3d2** を次の5つの入力データに加えます。

7. 相互作用チェックボックスにチェックを付け、相互作用の効果を計算します。

ANOVA Two Way RM

ダイアログ・テーマ *

説明 繰り返しのある二元配置分散分析を実行

再計算 手動

入力 記述統計 平均比較 出力

素データ値: 各列はファクター変数のレベルからのレスポンスデータを含みます。

☐ 入力データ 素データ値

☐ 因子 A

名前 drug

繰り返し

☐ レベルの数 3

☐ 因子 B

名前 dose

繰り返し

☐ レベルの数 2

☐ データ

☐ drug Level1

dose Level1 [TwoWayRMANOVA] Two-Way RM ANOVA

dose Level2 [TwoWayRMANOVA] Two-Way RM ANOVA

☐ drug Level2

dose Level1 [TwoWayRMANOVA] Two-Way RM ANOVA

dose Level2 [TwoWayRMANOVA] Two-Way RM ANOVA

☐ drug Level3

dose Level1 [TwoWayRMANOVA] Two-Way RM ANOVA

dose Level2 [TwoWayRMANOVA] Two-Way RM ANOVA

相互作用

有意水準 0.05

OK キャンセル

8. 記述統計ブランチで、相互作用だけでなく、因子のすべてのレベルの平均、標準誤差、95%信頼区間を計算します。

9. 平均比較のブランチを開き、Bonferroni のチェックを付けて Bonferroni 検定を有効にします。

10. OK ボタンをクリックして、分析を実行します。

結果の読み取り:

ANOVATwoWayRM1 ワークシートを開き、分析結果の表を開きます。

繰り返しのある一元配置 ANOVA の結果の読み取りについての詳細は、このヘルプファイルを参照してください。

多変量検定		値	F	数:	DF	確率>F
drug	Pillaiのトレース	0.133	1.99423	2	26	0.1564
	Wilksのラムダ	0.867	1.99423	2	26	0.1564
	Hotellingのトレース	0.1534	1.99423	2	26	0.1564
	Royの最大根	0.1534	1.99423	2	26	0.1564
dose	Pillaiのトレース	0.19986	6.74428	1	27	0.01504
	Wilksのラムダ	0.80014	6.74428	1	27	0.01504
	Hotellingのトレース	0.24979	6.74428	1	27	0.01504
	Royの最大根	0.24979	6.74428	1	27	0.01504
drug * dose	Pillaiのトレース	0.27164	4.8482	2	26	0.01624
	Wilksのラムダ	0.72836	4.8482	2	26	0.01624
	Hotellingのトレース	0.37294	4.8482	2	26	0.01624
	Royの最大根	0.37294	4.8482	2	26	0.01624

Origin は多変量分析を行い、繰り返しのある要因の影響を検出します。この例では、4つの手法(Pillai のトレース, Wilks のラムダ, Hotelling のトレース, Roy の最大根)で等しい F 統計量と確率を生成します。**drug** は P 値=0.1564 となっているので、**drugs** は慣習的な統計的有意水準に達しなかった事が分かります。同様に、**dose** と **drug*dose** はどちらも統計的に有意であるといえます。

Mauchlyの球面性検定

	MauchlyのW	近似カイ二乗	DF	Prob>カイ二乗	Greenhouse-Geisserのエプシロン	Huynh-Feldtのエプシロン	下限エプシロン
drug	0.84441	4.39712	2	0.11096	0.86536	0.9193	0.5
dose	0	0	0	0	1	1	1
drug * dose	0.47007	19.62694	2	5.47097E-5	0.65362	0.6734	0.5

警告: 球面性の検定は自由度が充分でないため実行されませんでした。

この表は Mauchly の球面性検定の結果とエプシロンの評価を記載しています。列 **Prob>カイ二乗** から、因子 A(drugs) の有意水準は 0.05 よりも大きくなっている事が分かります(P 値=0.11096)。そして、**drug*dose** の値は 0.05 よりも小さくなっています。つまり、**drug*dose** の球面性の仮定は破られていないことを示します。drug*dose の **Greenhouse-Geisser のエプシロン**=0.65362 となっており、この値は 0.75 よりも小さくなっています。この結果から、**Greenhouse-Geisser** 修正を使用して検定を続けていきます。

被験者内要因の検定

		二乗和	DF	二乗平均	F	確率>F
drug	球面性の仮定	0.06038	2	0.03019	2.88316	0.06461
	Greenhouse-Geisser	0.06038	1.73071	0.03489	2.88316	0.07313
	Huynh-Feldt	0.06038	1.8386	0.03284	2.88316	0.0696
	下限	0.06038	1	0.06038	2.88316	0.10101
誤差(drug)	球面性の仮定	0.56546	54	0.01047	0	0
	Greenhouse-Geisser	0.56546	46.72928	0.0121	0	0
	Huynh-Feldt	0.56546	49.64207	0.01139	0	0
	下限	0.56546	27	0.02094	0	0
dose	球面性の仮定	0.03982	1	0.03982	6.74428	0.01504
	Greenhouse-Geisser	0.03982	1	0.03982	6.74428	0.01504
	Huynh-Feldt	0.03982	1	0.03982	6.74428	0.01504
	下限	0.03982	1	0.03982	6.74428	0.01504
誤差(dose)	球面性の仮定	0.15942	27	0.0059	0	0
	Greenhouse-Geisser	0.15942	27	0.0059	0	0
	Huynh-Feldt	0.15942	27	0.0059	0	0
	下限	0.15942	27	0.0059	0	0
drug * dose	球面性の仮定	0.13506	2	0.06753	4.84575	0.0116
	Greenhouse-Geisser	0.13506	1.30725	0.10332	4.84575	0.02564
	Huynh-Feldt	0.13506	1.3468	0.10028	4.84575	0.0245
	下限	0.13506	1	0.13506	4.84575	0.03644
誤差(drug * dose)	球面性の仮定	0.75256	54	0.01394	0	0
	Greenhouse-Geisser	0.75256	35.29564	0.02132	0	0
	Huynh-Feldt	0.75256	36.36348	0.0207	0	0
	下限	0.75256	27	0.02787	0	0

この表からは因子についての F 値と共に、その値の有意水準と効果サイズが分かります。**drug** では、**prob>F** 列から P 値が 0.0641 となっているので、**drug** は被験者に対して有意な影響はありません。対して、**dose** は P 値が 0.01504 となっています。**drug*dose** の相互作用については、このまま **Greenhouse-Geisser** 修正を利用して検定を進めます。この値から、**drug*dose** の相互作用は有意な影響があるといえます。

drug

記述統計

	平均	標準誤差	95.00% LCL	95.00% UCL
drug Level1	1.0833	0.03709	1.00719	1.15941
drug Level2	1.05375	0.03436	0.98324	1.12426
drug Level3	1.0375	0.03383	0.9681	1.1069

対比較

Bonferroni検定

	行番号	平均差	標準誤差	DF	T値	Prob> T	Alpha	有意度フラグ	95.00% LCL	95.00% UCL
drug Level1 drug Level2	0	0.02955	0.01977	54	1.49462	0.4225	0.05	0	-0.0193	0.0784
drug Level1 drug Level3	1	0.0458	0.01977	54	2.31657	0.07305	0.05	0	-0.00305	0.09465
drug Level2 drug Level3	2	0.01625	0.01977	54	0.82195	1	0.05	0	-0.0326	0.0651

1は有意水準0.05で平均の差が有意であることを示しています。
 0は有意水準0.05で平均の差が有意ではないことを示しています。
 -1は平均の差が検定されていないことを示しています。

一般的に、Bonferroni 検定はどの平均の値が異なっていたのかということと、球面性の仮定が破られていなかどうか、という 2 点について推奨します。Bonferroni 検定による修正は全般的な確率の不等性に基づいて作成され、それにより特定の ANOVA の仮定から独立していることとなります。この表は Bonferroni 検定の結果で、平均は有意に異ならないと結論付け

ることができます($P > 0.05$ の時に有意フラグ=0のため)。もちろん、この場合薬(drug)は有意な影響を与えないので、対比較を実行する必要はありません。

dose				
記述統計				
	平均	標準誤差	95.00% LCL	95.00% UCL
dose Level1	1.07358	0.03494	1.00188	1.14527
dose Level2	1.04279	0.03267	0.97575	1.10982

対比較										
Bonferroni検定										
	行番号	平均差	標準誤差	DF	t 値	Prob> t	Alpha	有意度フラグ	95.00% LCL	95.00% UCL
dose Level1 dose Level2	0	0.03079	0.01614	27	1.90751	0.06714	0.05	0	-0.00233	0.06391

1は有意水準0.05で平均の差が有意であることを示しています。
0は有意水準0.05で平均の差が有意ではないことを示しています。
-1は平均の差が検定されていないことを示しています。

この表では、異なる用量の平均は有意に異ならないと結論付ける事ができます(P 値 = 0.06714 で、有意フラグ = 0のため)。

Bonferroni検定										
dose within drug = drug Level1										
	行番号	平均差	標準誤差	DF	t 値	Prob> t	Alpha	有意度フラグ	95.00% LCL	95.00% UCL
dose Level1 dose Level2	0	0.1063	0.02796	54	3.80208	0.00055	0.05	1	0.02043	0.19218

dose within drug = drug Level2										
	行番号	平均差	標準誤差	DF	t 値	Prob> t	Alpha	有意度フラグ	95.00% LCL	95.00% UCL
dose Level1 dose Level2	0	-0.03036	0.02796	54	1.08577	1	0.05	0	-0.11623	0.05552

dose within drug = drug Level3										
	行番号	平均差	標準誤差	DF	t 値	Prob> t	Alpha	有意度フラグ	95.00% LCL	95.00% UCL
dose Level1 dose Level2	0	0.01643	0.02796	54	0.58759	1	0.05	0	-0.06944	0.1023

drug within dose = dose Level1										
	行番号	平均差	標準誤差	DF	t 値	Prob> t	Alpha	有意度フラグ	95.00% LCL	95.00% UCL
drug Level1 drug Level2	0	0.09788	0.02796	54	3.50078	0.01408	0.05	1	0.01201	0.18375
drug Level1 drug Level3	1	0.09074	0.02796	54	3.24531	0.0025	0.05	1	0.00486	0.17661
drug Level2 drug Level3	2	-0.00714	0.02796	54	0.25548	1	0.05	0	-0.09302	0.07873

drug within dose = dose Level2										
	行番号	平均差	標準誤差	DF	t 値	Prob> t	Alpha	有意度フラグ	95.00% LCL	95.00% UCL
drug Level1 drug Level2	0	-0.03878	0.02796	54	1.38707	1	0.05	0	-0.12465	0.0470
drug Level1 drug Level3	1	8.61787E-4	0.02796	54	0.03082	1	0.05	0	-0.08501	0.0867
drug Level2 drug Level3	2	0.03964	0.02796	54	1.41789	1	0.05	0	-0.04623	0.1255

1は有意水準0.05で平均の差が有意であることを示しています。
0は有意水準0.05で平均の差が有意ではないことを示しています。
-1は平均の差が検定されていないことを示しています。

この表では、drug1 の中で比較すると dose1 の方が dose2 よりも効果が有意に大きく、dose1 の中で比較すると drug1 は drug2 と drug3 よりも有意に影響があると結論付ける事ができます。



5.3.5. 二元配置混合分析

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ユーザストーリー](#)
- [4 分析データの準備](#)
- [5 二元配置の混合分散分析を実行](#)
- [6 結果の解釈](#)

サマリー

二元配置混合分散分析は、二元配置の分割法(SPANOVA)としても知られています。繰り返し測定のある1つの因子とグループ間因子のANOVAです。

必要な Origin のバージョン: Origin 2016 SR0 以降

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について解説します。

- 二元配置混合分析の実行
- 二元配置混合分散分析 ANOVA の結果を読みとく

ユーザストーリー

研究者はある処置が人々の減量の助けになっているかどうかを知りたい。48人(24人は男性)の被験者がこの実験に参加しています。処置プログラムの期間、3か月ごとに彼らの体重を研究者は記録していきます。

分析データの準備

二元配置の混合分散分析 ANOVA を実施するには、次のようにデータを準備する必要があります。

Subject	グループ間因子	繰り返し測定因子		
	Gender	weight1	weight2	weight3
19	male	67.4	68.2	70.2
20	male	88.5	90.1	78.4
21	male	69	70.3	70.6
22	male	75.9	70.5	71.6
23	male	88	80.9	82.6
24	male	100.1	96.2	90.3
25	female	69.3	55.1	60.3
26	female	76.05	47.6	50.05
27	female	108.5	72.3	58.5
28	female	85.5	76.9	55.5
29	female	61.5	68.7	51.5
30	female	76.7	75.9	66.7
31	female	95.2	89.5	69.2

Notes: 二元配置混合分析を実行するために、データはインデックスモードに編集することも出来ます。このチュートリアルでのデータをインデックスモードについては、次のサンプルデータを参照します。

\\Samples\Statistics\ANOVA\two-way rm ANOVA1_indexed.dat,

二元配置混合分析の実行

1. 新しいプロジェクトまたは新しいワークブックを開きます。 *Samples\Statistics\ANOVA\two-way rm ANOVA1_raw.dat* をファイルをインポートします。
2. メニューから、**統計: ANOVA: 二元配置(繰り返し測定)**を選択します。
3. 開いたダイアログで、**入力タブ**を選択します。

- 入力データタブを素データ値に設定し、
- 因子 A のブランチを開き、名前を Weight に変え、レベルの数を 3 に設定します。因子 B のブランチを開き、名前を Gender に変え、繰り返しのチェックボックスからチェックを外します。
- データのブランチで、C, D 列と E 列を Weight Level1, Weight Level2 及び Weight Level3 にそれぞれ設定し、B 列は Gender に設定します。
- 相互作用のボックスにチェックを入れます。

Input	A(Y)	B(Y)	C(Y)	D(Y)	E(Y)
ログネーム	Subject	Gender	weight1	weight2	weight3
7	7	male	97.7	95.7	67.7
8	8	male	94	85.9	84
9	9	male	95.9	89.1	69.8
10	10	male	78	75.2	75
11	11	male	107	100.1	77
12	12	male	81.85	76.2	65.85
13	13	male	84	75.9	76.1
14	14	male	96.5	80.6	66.6
15	15	male	98	81.2	73
16	16	male	77.7	75.6	57.7
17	17	male	92	80.1	75.9
18	18	male	103	82.3	85.3
19	19	male	67.4	68.2	70.2
20	20	male	88.5	90.1	78.4
21	21	male	69	70.3	70.6
22	22	male	75.9	70.5	71.6
23	23	male	88	80.9	82.6
24	24	male	100.1	96.2	90.3
25	25	female	69.3	55.1	60.3
26	26	female	76.06	47.6	50.06
27	27	female	100.5	72.3	59.5
28	28	female	85.5	76.9	55.5
29	29	female	61.5	68.7	51.5
30	30	female	76.7	75.9	66.7
31	31	female	96.3	68.5	62.3
32	32	female	85.3	75.1	65.3

4. 記述統計タブを選択し、全てのボックスにチェックを入れます。

入力 記述統計 平均比較 出力

因子A

因子B

相互作用

5. 平均比較のタブを開いて、Bonferroni のチェックボックスにチェックを入れます。



6. OK ボタンをクリックして、分析を実行します。

結果の解釈

ANOVA Two Way RM1 ワークシートを開き、分析結果の表を開きます。

繰り返しのある二元配置 ANOVA の結果の読み取りについての詳細は、結果の解釈ヘルプファイルを参照してください。

1. **Mauchly の球面性検定**の欄から、**Prob>カイ二乗(0.01258) < 0.05**を確認出来ます。繰り返し測定変数、**Weight** は、球面性の過程を満たしています。**Greenhouse-Geisser** 補正なども考慮する必要があります。Epsilon が 0.75 より大きい場合は、次のステップ 2 にある、Huynh and Feldt 補正に着目します。

Mauchlyの球面性検定							
	MauchlyのW	近似カイ二乗	DF	Prob>カイ二乗	Greenhouse-Geisserのエプシロン	Huynh-Feldtのエプシロン	下限エプシロン
Weight	0.82327	8.75143	2	0.01258	0.84981	0.89821	0.5

2. **被験者内要因の検定**の欄を見ると、
 - **Weight** の項目で、**確率>F** 列の p 値はほぼ 0 です。これは、体重は常に変動する有意に影響していることを示しています。
 - **Weight*Gender** が明らかに異なる場合(p_value = 0.14025)、**Weight*Gender** は明らかに有意に影響していないと結論づけられます。

被験者内要因の検定						
		二乗和	DF	二乗平均	F	確率>F
Weight	球面性の仮定	6328.11622	2	3164.05811	40.71343	2.16215E-13
	Greenhouse-Geisser	6328.11622	2	3164.05811	40.71343	9.9634E-12
	Huynh-Feldt	6328.11622	2	3164.05811	40.71343	2.89727E-12
	下限	6328.11622	2	3164.05811	40.71343	7.76453E-8
Weight * Gender	球面性の仮定	318.3098	2	159.1549	2.04792	0.13484
	Greenhouse-Geisser	318.3098	1.69962	187.28303	2.04792	0.14282
	Huynh-Feldt	318.3098	1.79641	177.19204	2.04792	0.14025
	下限	318.3098	1	318.3098	2.04792	0.15917
誤差(Weight)	球面性の仮定	7149.81058	1	7149.81058	1	0.5
	Greenhouse-Geisser	7149.81058	78.1	91.54821	1	0.5
	Huynh-Feldt	7149.81058	82.63493	86.52286	1	0.5
	下限	7149.81058	46	155.43066	1	0.5

3. 処置を行っている間に、体重がどのように変化しているかをさらに調査することが出来ます。**Weight** の欄を広げ、**記述統計**の欄から、

- 体重が減少していることが分かります。
- **対比較**の欄にある**有意義フラグ**列の 1 は、対になっているグループが有意に異なることを示しています。体重が明らかに減少していると結論づけることが出来ます。

記述統計				
	平均	標準誤差	95.00% LCL	95.00% UCL
Weight Level1	83.28479	2.28578	78.84606	87.72352
Weight Level2	74.66625	1.59795	71.44974	77.88276
Weight Level3	67.05729	1.29317	64.57505	69.53953

体重の増加

Bonferroni検定										
行番号	平均差	標準誤差	DF	T値	Prob> T	Alpha	有意度フラグ	95.00% LCL	95.00% UCL	
Weight Level1 Weight Level2	0	8.61854	179948	92	4.78945	1.91332E-5	0.05	1	4.29043	13.00666
Weight Level1 Weight Level3	1	16.2275	179948	92	9.01787	7.98371E-14	0.05	1	11.89939	20.61561
Weight Level2 Weight Level3	2	7.60896	179948	92	4.22841	1.66392E-4	0.05	1	3.22084	11.99707

それぞれの組合せで有意に異なる

1は有意水準0.05で平均の差が有意であることを示しています。
 0は有意水準0.05で平均の差が有意でないことを示しています。
 -1は平均の差が検定されていないことを示しています。

4. **被験者間要因の検定**の欄で、**Gender** が影響しており、男性と女性では有意に異なることが分かります。

被験者間要因の検定					
	二乗和	DF	二乗平均	F	確率>F
切片	810060.00111	1	810060.00111	2961.43253	2.07173E-43
Gender	8857.94694	1	8857.94694	32.38305	8.40281E-7
誤差	12582.68074	46	273.53654	0	0

5. Gender ブランチを見て、次の詳細を確認します。

- ここには、2つのレベルの性別が存在しており、違いも分かっているので、**対比較**の欄を確認する必要はありません。
- **記述統計**の欄で、男性の平均体重のほうが女性の体重より重いことが分かります。

Gender				
記述統計				
	平均	標準誤差	95.00% LCL	95.00% UCL
male	82.84583	1.94913	78.92243	86.76923
female	67.15972	1.94913	63.23632	71.08312

Notes 球面性の過程の深刻な違反は無いので、**多変量検定**の欄は無視することが出来ます。さらに詳しい内容は結果の解釈のヘルプページをごらんください。

5.3.6. 三元配置分散分析

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ユーザストーリー](#)
- [4 三元配置の分散分析を実行](#)
- [5 有効な交互作用の分析](#)
- [6 結果の解釈](#)
 - [6.1 全般 ANOVA](#)
 - [6.2 3つの主要な影響の平均比較と平均プロット](#)
 - [6.2.1 発展途上国と先進国との比較](#)
 - [6.2.2 年数の比較](#)
 - [6.2.3 地域の比較](#)
 - [6.3 異なるグループ間の同レベル比較](#)

サマリー

三元配置の分散分析は、主要な影響及び、従属変数の中の3要素に対する全ての組合せ同士の相互作用を検定します。
必要な Origin のバージョン: Origin 2016 SR0 以降

学習する項目

1. 実際のデータで三軒配置の分散分析を実行する方法
2. 算出された結果の読み取り方

ユーザストーリー

ワールドバンクから得た公開データがいくつかあります。これには、地域(Asia/Europe/Africa, etc.), 発展途上国索引(発展途上国/先進国)と年(2000/2005/2010)の3つの要素が含まれます。インターネットユーザーの数にこれらの3つのファクターがどのように影響してくるのか及び、グループ間の明らかな相違があるかどうかを理解したいと考えています。

三元配置の分散分析を実行

1. メニューからヘルプ: **Origin Central** を選択して、Origin Central ダイアログを開きます。左側のリストから**解析サンプル**を選択し、右側の**サンプルドロップダウンリスト**から**統計 - ANOVA**を選択します。
2. 表示されたリストの3つ目の項目を選択して、*Three Way ANOVA* フォルダを開きます。
3. ソースデータを含むワークシート Sheet1 をクリックします。
4. **統計: ANOVA: 三元配置分散分析**を選択します。

5. 開いたダイアログのインプットのタブで、**入力データ**を **インデックス**に設定します。入力データのブランチを開いて、Aファクター、Bファクター、Cファクター、Dファクターをそれぞれ選択します。

入力 モデル 記述統計 平均比較 検出力解析 平均値プロット 出力

インデックス:ファクター変数とレスポンスデータは別個の列に格納されます。

☐ 入力データ インデックス ▾

因子 A	[wayANOVA]Sheet1!C"Developing Index"	🗑️ ▶
因子 B	[threewayANOVA]Sheet1!D"Year"	🗑️ ▶
因子 C	[threewayANOVA]Sheet1!B"Region"	🗑️ ▶
データ	[threewayANOVA]Sheet1!E"internet use"	🗑️ ▶

等分散性の検定 (ルービンの検定)

有意水準

6. **モデル**のタブで、全てのボックスが選択されていることを確認します。ここでは、全ての要素モデルが、三元配置の分散分析にりようされるように決定します。

入力 **モデル** 記述統計 平均比較 検出力解析 平均値プロット 出力

データ = A + B + C + A*B + A*C + B*C + A*B*C

効果 A*B

効果 A*C

効果 B*C

効果 A*B*C

7. **OK** をクリックして設定を適用し、ダイアログを閉じます。
8. **ANOVA3way1.** に移動します。主要な影響と相互作用のための ANOVA 検定を含む ANOVA が、全 ANOVA テーブルにはまします。もし、P 値が 0.05 よりも小さかった場合、対応するファクターにあるレベルは、明らかに異なります。テーブルの下にあるフットノートの結果を記録します。。

全般ANOVA					
	DF	二乗和	二乗平均	F値	P値
Developing Index	1	23652.65024	23652.65024	132.61578	0
Year	2	15248.13748	7624.06874	42.74666	0
Region	5	15055.32285	3011.06457	16.88245	1.77636E-15
Developing Index * Year	2	511.16006	255.58003	1.43299	0.23954
Developing Index * Region	5	9230.53132	1846.10626	10.35076	1.78556E-9
Year * Region	10	5342.29117	534.22912	2.99532	0.0011
Developing Index * Year * Region	10	896.73603	89.6736	0.50278	0.88834
モデル	35	241745.07507	6907.00214	38.72621	0
誤差	516	92031.03363	178.35472		0
修正和	551	333776.1087	0	0	0

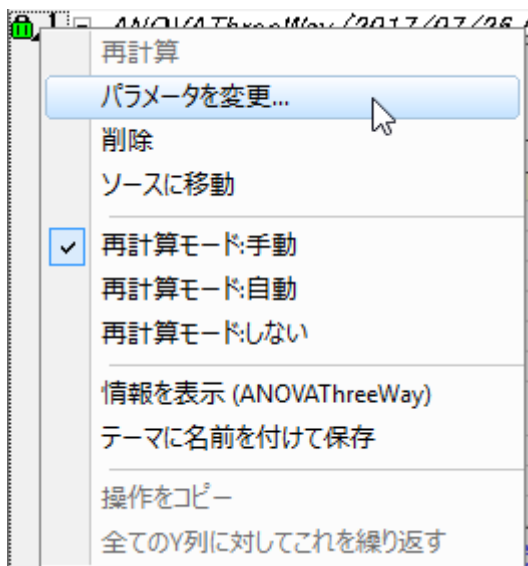
有意水準0.05では、Developing Indexの母集団の平均は有意に異なります。
 有意水準0.05では、Yearの母集団の平均は有意に異なります。
 有意水準0.05では、Regionの母集団の平均は有意に異なります。
 有意水準0.05では、Developing Index * Yearの母集団の平均は有意に異なります。
 有意水準0.05では、Developing Index * Regionの母集団の平均は有意に異なります。
 有意水準0.05では、Year * Regionの母集団の平均は有意に異なります。
 有意水準0.05では、Developing Index * Year * Regionの母集団の平均は有意に異なります。

全 ANOVA テーブル上から、二元相互ファクター**発展途上国索引*年**は明らかに有効ではない (p-value = 0.23954)と分かります。三元相互ファクター**地域*発展途上国*年**は有効ではありません。(p-value = 0.88834)。

有効な相互作用の分析

次に、有効な交互関係を見せるファクターについて調べて行きます。

- ANOVA3Way1 シートにある錠前マークをクリックし、**パラメータを変更**をコンテキストメニューから選びます。



- モデルタブで、検出できなかったファクターと関係する **Effect A*B** 及び **Effect A*B*C** のチェックボックスからチェックを外します。

入力	モデル	記述統計	平均比較	検出力解析	平均値プロット	出力
データ = $A + B + C + A*B + A*C + B*C + A*B*C$						
効果 A*B	<input type="checkbox"/>					
効果 A*C	<input checked="" type="checkbox"/>					
効果 B*C	<input checked="" type="checkbox"/>					
効果 A*B*C	<input type="checkbox"/>					

- 平均比較のタブを開いて、**Bonferroni** のチェックボックスにチェックを入れます。Bonferroni は最も一般的に利用されるポストホックテスト(多重比較の群間検定)です。これは全てのタイプ I のエラーを制御します。
- プロット平均のタブを開いて、全ての利用可能なチェックボックスにチェックを入れます。**Effect A*B** と **Effect A*B*C** はモデルに含まれていないので、利用できなくなっています。

入力	モデル	記述統計	平均比較	検出力解析	平均値プロット	出力
因子A	<input checked="" type="checkbox"/>					
因子B	<input checked="" type="checkbox"/>					
因子C	<input checked="" type="checkbox"/>					
効果 A*B	<input type="checkbox"/>					
効果 A*C	<input checked="" type="checkbox"/>					
効果 B*C	<input checked="" type="checkbox"/>					
効果 A*B*C	<input type="checkbox"/>					

- OK** をクリックして設定を適用し、ダイアログを閉じます。

結果の解釈

ANOVA3Way1 シートにある結果は、新しい計算パラメーターを使うことで更新されます。

全般 ANOVA

全般ANOVA					
	DF	二乗和	二乗平均	F値	P値
Developing Index	1	24445.97236	24445.97236	138.04613	0
Year	2	44473.73843	22236.86921	125.57135	0
Region	5	15019.51175	3003.90235	16.963	1.44329E-15
Developing Index * Region	5	9809.01069	1961.80214	11.07827	3.65762E-10
Year * Region	10	20038.12871	2003.81287	11.31551	0
モデル	23	240274.94891	10446.73691	58.99261	0
誤差	528	93501.15979	177.08553	0	0
修正和	551	333776.1087	0	0	0

有意水準0.05では、**Developing Index**の母集団の平均は**有意**に異なります。
 有意水準0.05では、**Year**の母集団の平均は**有意**に異なります。
 有意水準0.05では、**Region**の母集団の平均は**有意**に異なります。
 有意水準0.05では、**Developing Index * Region**の母集団の平均は**有意**に異なります。
 有意水準0.05では、**Year * Region**の母集団の平均は**有意**に異なります。

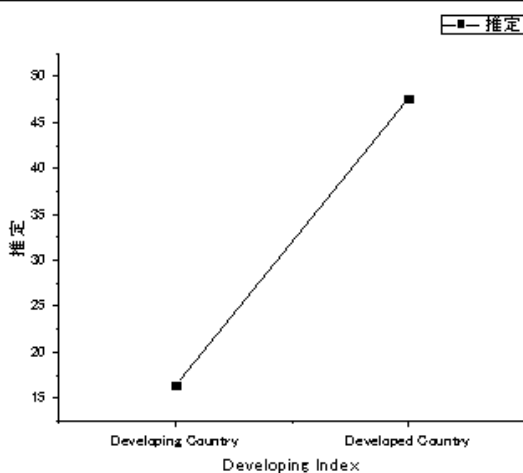
テーブルから、全ての残差影響は明らかに異なることが分かります。それぞれのグループ間の相違を検出するために、**平均比較結果とプロット平均**を使うことが出来ます。

3つの主要な影響の平均比較と平均プロット

ANOVA: 平均比較: **Bonferroni Test** と選択すると、個々の影響のための平均比較テーブルを確認出来ます。これは、グループのメンバー間のペアワイズ比較のための結果シート下側にあるプロット平均と併せて使える便利な機能です。

発展途上国と先進国との比較

Developing Index		平均差:	SEM	t値	Prob	Alpha	有意水準	LCL	UCL
Developing Country	Developed Country	-31.24647	2.60098	-12.01337	0	0.05	1	-36.356	-26.13694

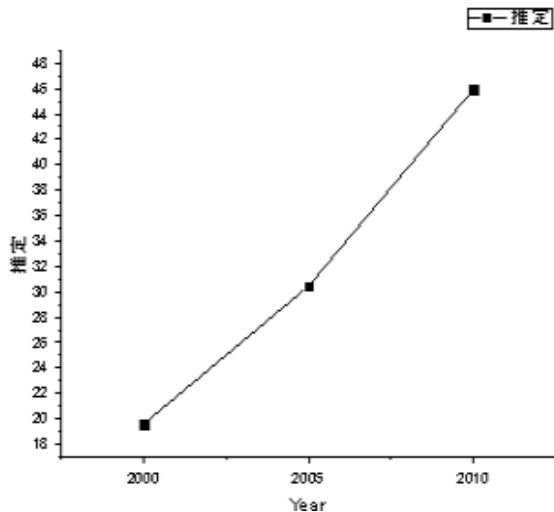


この列の1は、グループの対は有意に異なることを示しています。比較の詳細は平均値プロットを確認します。

上の結果から、発展途上国のインターネットユーザーの数は、先進国よりもはるかに少ないことが分かります。

年での比較

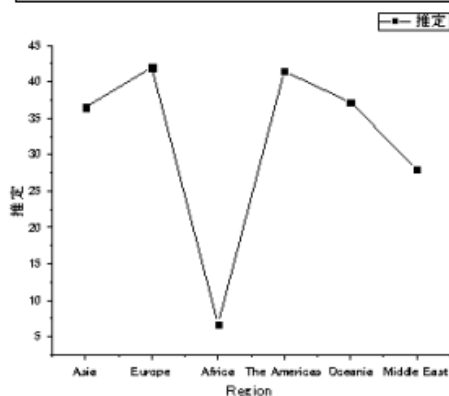
Year		平均差:	SEM	t値	Prob	Alpha	有意水準	LCL	UCL
2000	2005	-10.83912	1.60085	-6.77087	1.02557E-10	0.05	1	-14.68377	-6.99448
2000	2010	-26.34647	1.6363	-16.10126	0	0.05	1	-30.27626	-22.41668
2005	2010	-15.50735	1.5908	-9.74813	0	0.05	1	-19.32787	-11.68682



上の結果から、2000年から2010年の間ではインターネットユーザーの数が急増していることがわかります。

地域での比較

Region		平均差:	SEM	t値	Prob	Alpha	有意水準	LCL	UCL
Asia	Europe	-5.46197	3.9887	-1.36936	1	0.05	0	-17.22311	6.29917
Asia	Africa	29.83188	5.38213	5.54277	7.06154E-7	0.05	1	13.96204	45.70172
Asia	The Americas	-4.9414	4.44103	-1.11267	1	0.05	0	-18.0363	8.15349
Asia	Oceania	-0.65636	4.96954	-0.13208	1	0.05	0	-15.30964	13.99693
Asia	Middle East	8.50447	5.46795	1.55533	1	0.05	0	-7.61842	24.62736
Europe	Africa	35.29385	3.96669	8.89755	0	0.05	1	23.59758	46.99011
Europe	The Americas	0.52057	2.54757	0.20434	1	0.05	0	-6.99124	8.03237
Europe	Oceania	4.80561	3.38581	1.41934	1	0.05	0	-5.17785	14.78908
Europe	Middle East	13.96644	4.08238	3.42115	0.01008	0.05	1	1.92906	26.00382
Africa	The Americas	-34.77328	4.42128	-7.86499	3.13083E-13	0.05	1	-47.80994	-21.73662
Africa	Oceania	-30.48824	4.9519	-6.15688	2.20497E-8	0.05	1	-45.0895	-15.88697
Africa	Middle East	-21.32741	5.45192	-3.91191	0.00155	0.05	1	-37.40304	-5.25178
The Americas	Oceania	4.28504	3.90855	1.09633	1	0.05	0	-7.23977	15.80986
The Americas	Middle East	13.44587	4.52536	2.97123	0.04652	0.05	1	0.10232	26.78943
Oceania	Middle East	9.16083	5.04504	1.81581	1	0.05	0	-5.71508	24.03674



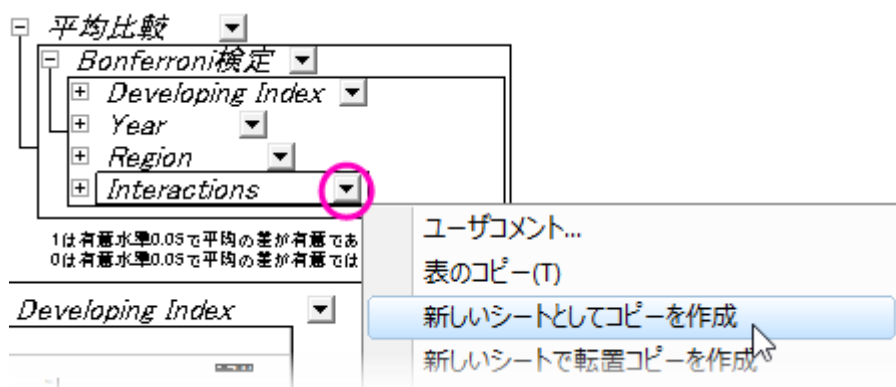
上の結果は、

- アフリカのインターネットユーザーは、他の国よりも明らかに少ないことを語っています。
- 中東のインターネットユーザーは、ヨーロッパやアメリカに比べて、明らかに少ないことが分かります。
- 他の国同士では、明らかな差はありません。



異なるグループ間の同レベル比較

相互関係の平均比較結果から、異なるグループ間のサンプルレベルを比較することが出来ます。次に、関心のある結果を素早く閲覧するための、データフィルタの使い方を紹介します。

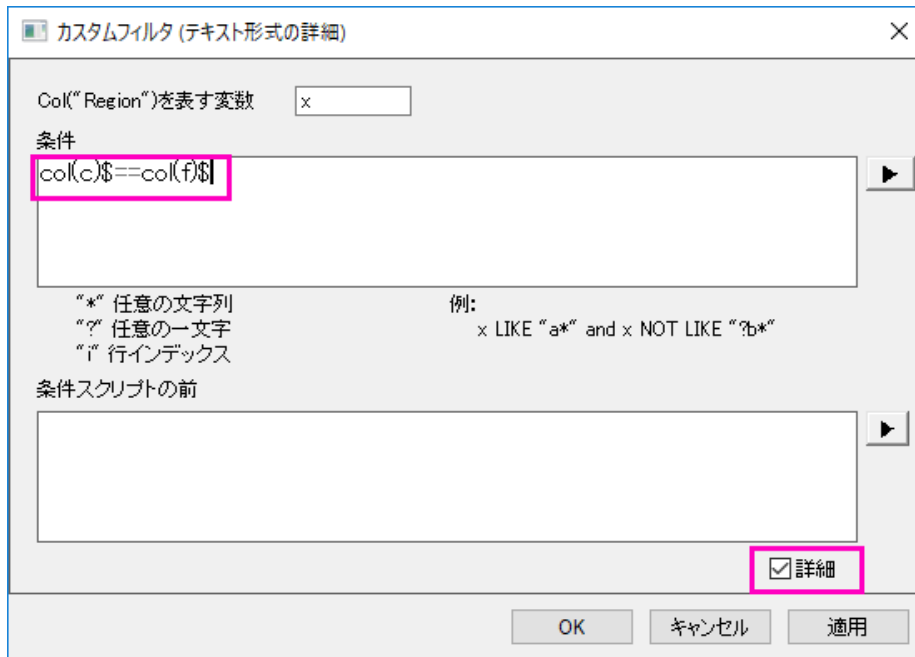
1. ANOVA3Way1 のワークシートで、ANOVA: 平均比較: Bonferroni と開きます。
2. 相互関係の隣にある三角形のボタンをクリックして、コンテキストメニューから新しいシートとしてコピーを作成するを選択します。



3. 作成された相互関係のシートに移ります。結果のデータフィルタを適用された異なる地域の発展途上国と先進国を比較します。

1. C 列を選択し、データフィルタの追加/削除ボタン  をクリックして、データフィルタを列に追加します。
2. 列ヘッダのフィルタアイコン  をクリックし、カスタムフィルタを選択します。
3. 開いたダイアログの右下にある、詳細のチェックボックスを選択します。条件ボックスに次のスクリプトを記入します。

```
col (c) $==col (f) $
```

4. 結果から次の内容が分かります。

- 先進国及び発展途上国のインターネットユーザー数は、アフリカや中東の数と大きく異なってはいない。
- 先進国のインターネットユーザー数は、次の4つ大陸の発展途上国より明らかに多い。

1. アジア

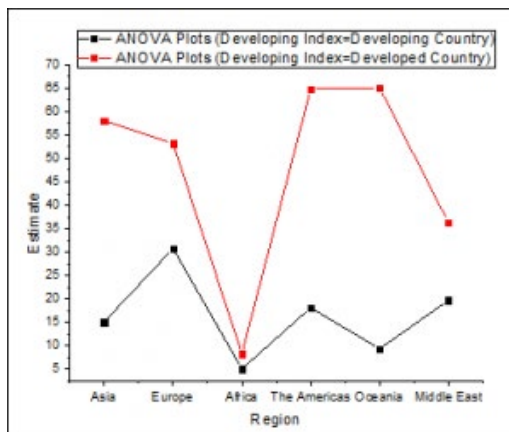
2. ヨーロッパ

3. アメリカ

4. オセアニア

種	A(Y)	B(Y)	C(Y)	D(Y)	E(Y)	F(Y)	G(Y)	H(Y)±	I(Y)	J(Y)	K(Y)	L(Y)	M(Y)	N(Y)
ロングネーム	Developing Index	Year	Region	Developing Index	Year	Region	平均差:	SEM	t値	Prob	Alpha	有意水準	LCL	UCL
フィルタ			col(c)\$=col(f)\$											
1	Developing Country	--	Asia	Developed Country	--	Asia	-42.92764	7.63444	-5.6229	*****	0.05	1	-68.79032	-17.06497
17	Developing Country	--	Europe	Developed Country	--	Europe	-22.4491	2.31388	-9.70192	*****	0.05	1	-30.28769	-14.61051
27	Developing Country	--	Africa	Developed Country	--	Africa	-3.25806	7.58844	-0.42935	1	0.05	0	-28.96493	22.4488
36	Developing Country	--	The Americas	Developed Country	--	The Americas	-46.80039	4.53941	-10.28573	*****	0.05	1	-61.97825	-31.22253
44	Developing Country	--	Oceania	Developed Country	--	Oceania	-65.84837	6.35642	-8.35842	*****	0.05	1	-77.17396	-54.0716
51	Developing Country	--	Middle East	Developed Country	--	Middle East	-16.93525	7.83002	-2.12046	1	0.05	0	-43.12641	9.2191
72	--	2000	Asia	--	2005	Asia	-82.7068	3.26534	-25.4064	1	0.05	0	-20.04479	3.60583
78	--	2000	Asia	--	2010	Asia	-21.84267	3.93085	-6.05665	*****	0.05	1	-30.70551	-9.97982

この列の1は、レベルの対が有意に異なることを意味し、0は有意に異なることを示しています。



5.4. ノンパラメトリック検定

5.4.1. ノンパラメトリック検定概要

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 イントロダクション: Origin でノンパラメトリック検定を行う](#)
- [4 サンプル](#)
 - [4.1 1 集団の独立検定](#)
 - [4.2 2 集団の独立検定](#)
 - [4.3 相関に関するノンパラメトリック測定](#)
 - [4.4 対応のあるデータの Wilcoxon 符号順位検定](#)
 - [4.5 複数の独立標本検定](#)
 - [4.6 複数の繰り返しのある標本検定](#)

サマリー

ノンパラメトリック検定はデータが正規分布するかわからない時や、正規分布に従わないと確認済みであるときに使用されます。

必要な Origin のバージョン: Origin 8.0 SR6 以降

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- Origin を使用したノンパラメトリック検定のイントロダクション
- 様々な状況に合わせてノンパラメトリック検定を行う
- ノンパラメトリック統計で相関係数を計算する方法

イントロダクション: Origin でノンパラメトリック検定を行う

ノンパラメトリック検定は、正規性の仮定必要としません。一般に、次のような状況で使用されます。

- 小さな標本サイズ
- カテゴリ/バイナリ/序数のデータ
- 正規分布と仮定できない場合

		ノンパラメトリック	パラメトリック
		全ての分布からのデータ	正規分布からのデータ
		小さい集団	大きい集団
1 集団		Wilcoxon の符号順位検定	t 検定 (1 集団)
2 集団	独立集団	<ul style="list-style-type: none"> Mann-Whitney 検定 Kolmogorov-Smirnov 検定 	t 検定 (2 集団)
	対応集団	<ul style="list-style-type: none"> Wilcoxon の符号順位検定 符号検定 	t 検定 (対応あり)
複数集団	独立集団	<ul style="list-style-type: none"> Kruskal-Wallis 分散分析 Mood のメディアン検定 	一元配置の分散分析
	関連集団	Friedman 分散分析	繰り返しのある一元配置の分散分析

サンプル

1 集団の独立検定

1 集団の Wilcoxon の符号順位検定は、特定の値に対して母集団の中央値が適切か否かを検定します。片側または両端の検定から選ぶことができます。Wilcoxon の符号順位検定の仮定は、「H0: 中央値は仮定した中央値と等しい」に対して「H1: 中央値は仮定した中央値と等しくない」になります。

この例では、製造店勤務の品質管理技術者が製品の重さの中央値(または、平均)が 166 と等しくなるか調べます。技術者は 10 個の製品をランダムに取り出し、重さを測りました。151.5 152.4 153.2 156.3 179.1 180.2 160.5 180.8 149.2 188.0 技術者は正規性検定を行い、このデータの分布が正規分布か否かを判断します。

1. 新しいワークシートを開き、上記データを列 A をに入力します。メニューから**統計: 記述統計: 正規性検定**を行い、**正規性検定**ダイアログを開きます。
2. **データ範囲**として A(X)を選択します。



3. **OK** ボタンをクリックし、結果を出力します。

Shapiro-Wilk				
	DF	統計	p値	水準(5%)で判定
A	10	0.89472	0.03814	正規性の棄却

A: 検定水準0.05で、データが正規母集団から取り出されたとはいえません。

結果によると、P 値 = 0.03814 となっており、このデータは 0.05 レベルでは正規分布ではない、という事ができます。1 集団の Wilcoxon 符号付順位検定を実行するには

1. メニューで、**統計:ノンパラメトリック検定:1 集団の Wilcoxon 符号付順位検定**と選択してダイアログを開きます。
2. 列 A を入力としてセットします。
3. **検定の中央値として 166** をテキストボックスに入力します。



4. **OK** ボタンをクリックし、結果を出力します。

記述統計						
	N	最小	Q1	中央値	Q3	最大
A	10	149.2	152.175	158.4	180.35	188

検定統計				
	W	Z	正確確率 > W	漸近確率 > W
A	28	0	1	1

帰無仮説: 中央値 = 166
 対立仮説: 中央値 < 166
 A: 有意水準 0.05 では、母集団の中央値は検定の中央値(166)と有意に異なりません。

結果によると、帰無仮説を 0.05 レベルで棄却できないので、結果として中央値は 166 と等しいといえます。

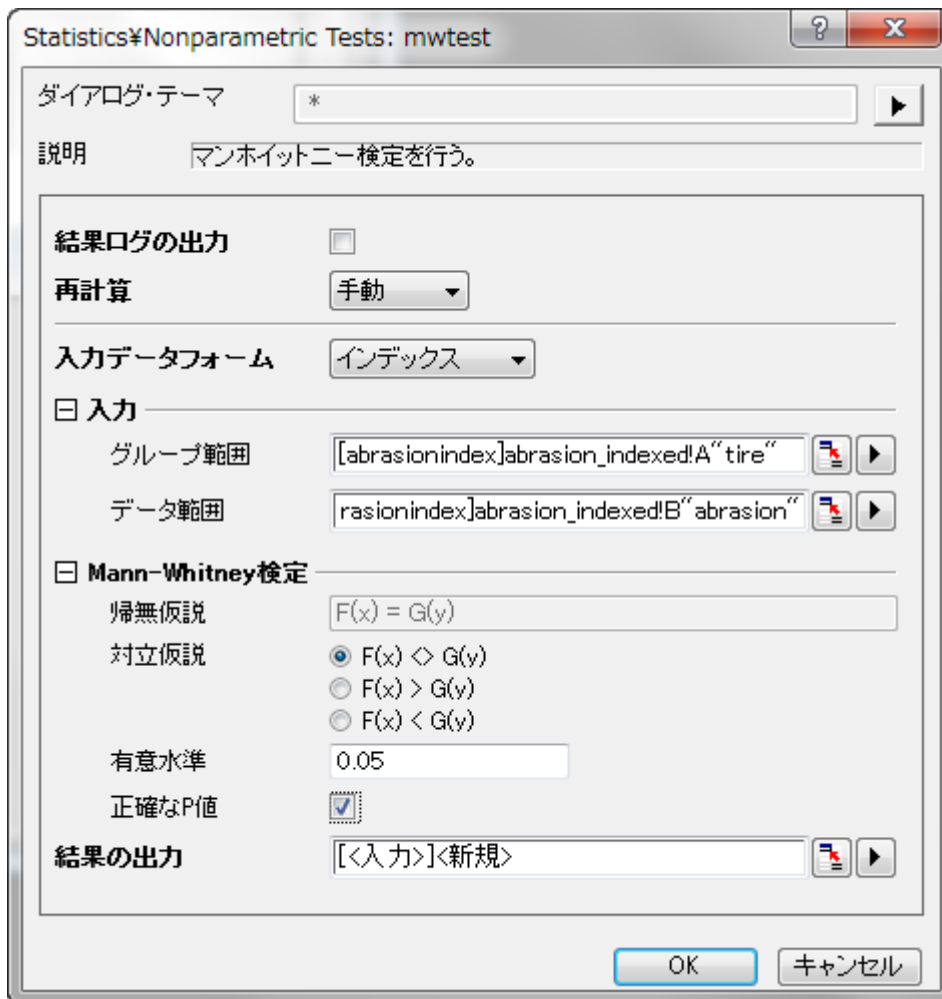
2 集団の独立検定

Origin は集団が独立システムとなっている時に使用できるノンパラメトリック統計検定として、マンホイットニー検定と 2 集団の Kolmogorov-Smirnov 検定の 2 つを用意しています。

次の例題はマンホイットニー検定の実用的な例を示します。2 種類のタイヤ(A と B) ですり減り具合 (mg) の量を測定し、各タイヤに 8 つの実験が行われました。このデータはインデックス化され、abrasion_indexed.dat に保存されています。

1. \Samples\Statistics\ から abrasion_indexed.dat をインポートします。
2. 統計:ノンパラメトリック検定:マンホイットニー検定と選択してダイアログを開きます。
3. 入力データフォームはインデックスのままにします。
4. 列 A をグループ範囲、列 B をデータ範囲として設定します。

5. 正確な P 値のチェックボックスをチェックします。



6. OK ボタンをクリックすると MannWhitney1 シートに結果が出力されます。

検定統計

	U	Z	正確 Prob> U	漸近線 Prob> U
	34.5	0.2102	0.82191	0.83351

帰無仮説: $F(x) = G(y)$
 対立仮説: $F(x) < G(y)$
 検定水準0.05で、2つの分布は有意に異なるとはいえません。

- **U:** U 統計は 2 集団のランクから計算されます。2 番目の集団のスコアが 1 番目の集団よりも大きかった回数を記録します。
- **Z:** おおよその標準検定統計です。標本数が大きくなればなるほどより正確に予測できるようになります。
- 正確な P 値はダイアログ内で**正確な P 値**を選択していないと確認できません。ただし、大きなサンプルの場合、CPU 時間がかかります。
- **漸近的 P 値:** 漸近的 P 値はおおよその標準統計検定 Z から計算されています。

相関に関するノンパラメトリック測定

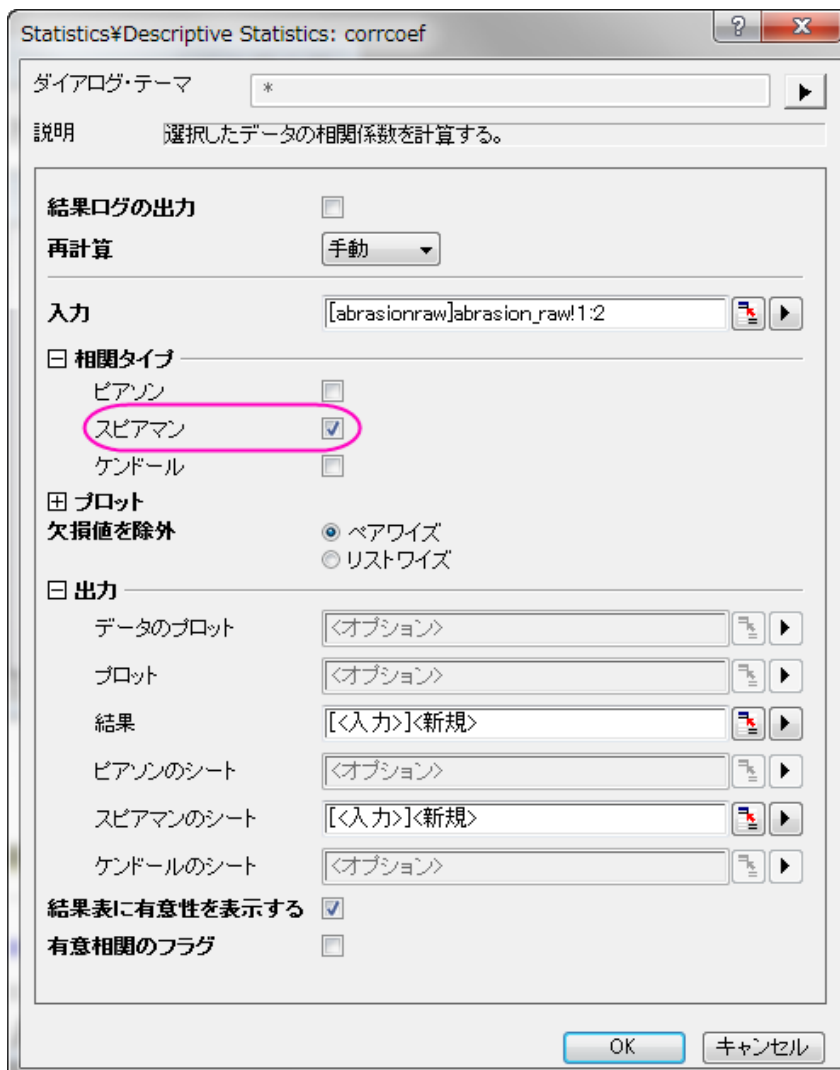
相関係数は2つの変数間の関係性を見るのに使用されます。ノンパラメトリック統計でも、相関係数を計算することが可能です。

Originは相関係数を計算する2種類のノンパラメトリック手法を搭載しています。

- **Spearman**: Pearson 相関係数の代替として良く利用されます。Spearman の係数は、従属変数と独立変数の両方が序数、または、片方が序数でもう一方が連続変数である場合に利用できます。しかし、Spearman の係数は両方の変数が連続数の場合でも使用できます。
- **Kendall**: 序数の変数で利用され、各評価者間の同意地点を見つけるために利用されます。

次のサンプルは、ノンパラメトリックを使う時の相関係数を計算する方法を示します。

1. **Samples\Statistics** から abrasion_raw.dat ファイルをインポートします。
2. 列 A と列 B を選択します。そしてメニューから **統計: 記述統計: 相関係数** と選択し、corrcoef ダイアログを開きます。
3. **スピアマン** にチェックを付け、**ピアソン** のチェックを外します。



4. **OK** ボタンをクリックし、**CorrCoef1** シートに結果を出力します。

Spearman 相関の値から、AタイヤとBタイヤのすり減り具合には相関があるといえます。

☐ Spearman 相関 ▼

		tireA	tireB
"tireA"	Spearman Corr.	1	0.90476
	Sig.	--	0.00201
"tireB"	Spearman Corr.	0.90476	1
	Sig.	0.00201	--

有意性の両側検定が使われました

対応のあるデータの Wilcoxon 符号順位検定

上記例で利用した、AタイヤとBタイヤの中央値を比較します。

1. **Samples\Statistics** から abrasion_raw.dat ファイルをインポートします。
2. **統計:ノンパラメトリック検定:対応のあるデータの wilcoxon 符号順位検定**を選択してダイアログを開きます。
3. 列 A を **第 1 データ範囲**、列 B を **第 2 データ範囲**で設定します。



4. **OK** ボタンをクリックし、結果を生成します。

記述統計						
	N	最小	Q1	中央値	Q3	最大
"tireA"	8	4870	4980	5760	7330	8650
"tireB"	8	4900	4950	5420	6687.5	7930

ランク				
		N	平均値ランク	和ランク
"tireB" - "tireA"	正ランク	2	1.5	3
	負のランク	6	5.5	33

検定統計					
	W	Z	正確 Prob> W	漸近線 Prob> W	
	33	2.0329	0.03906	0.04206	

帰無仮説: $F(x) = G(y)$
 対立仮説: $F(x) \neq G(y)$
 検定水準0.05で、2つの分布は有意に異なります。


最終的に2つの中央値は有意に異なる、と結論付ける事ができます。一見して分かりますが、グループAの中央値の方がグループBより大きくなっています。

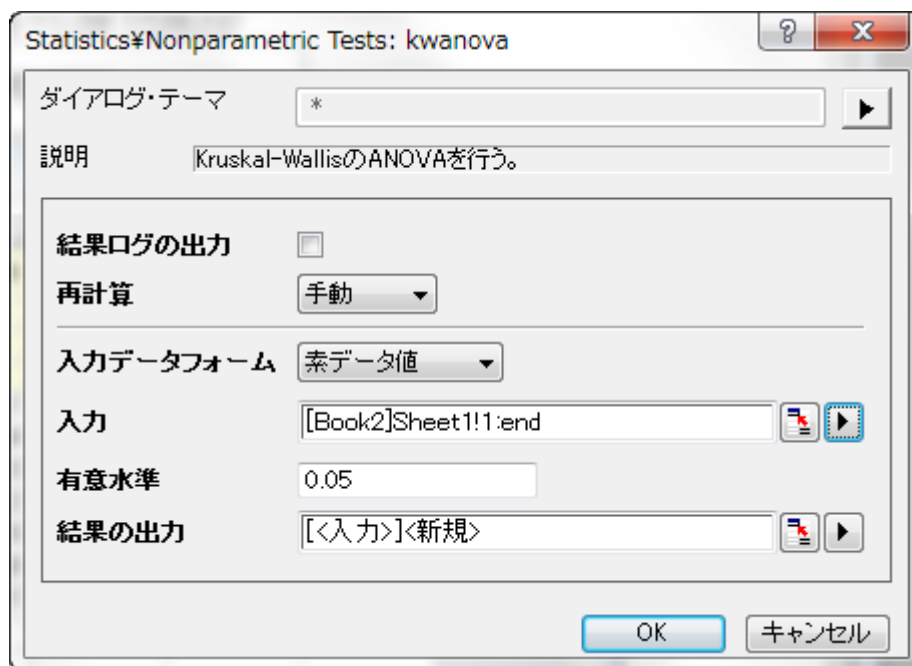
複数の独立標本検定

この例題では4種類の車の燃費が測定されました。各車に対して複数の実験が行われました。結果は以下の表にまとめられています。

GMC/mpg	Infinity/mpg	Saab/mpg	Kia/mpg
26.1	32.2	24.5	28.4
28.4	34.3	23.5	34.2
24.3	29.5	26.4	29.5
26.2	35.6	27.1	32.2
27.8	32.5	29.9	
30.6	30.2		
28.1			

これら4つの製造元で作られた車の燃費の等しさ、あるいは、一番効率的な車かを評価するのに、ノンパラメトリック検定の1つである、Kruskal-WallisのANOVAを行います。

- Originで新しいワークブックを作成し、そこにサンプルデータをコピーして貼り付けます。
- メニューから**統計:ノンパラメトリック検定:Kruskal-WallisのANOVA**と選択し、kwanovaダイアログを表示します。
- 入力データフォームで「行」を選びます。
- 入力の隣にある**三角形のボタン**  をクリックし、コンテキストメニュー内にある**全列**を選びます。



5. **OK** ボタンをクリックすると結果を新しいワークシート **KWANOVA1** に表示します。

p 値から、これらの 4 つの製造元の車の燃費は有意に異なるという事ができます。

検定統計			
カイ二乗	DF	Prob>	カイ二乗
12.59645	3	0.0056	

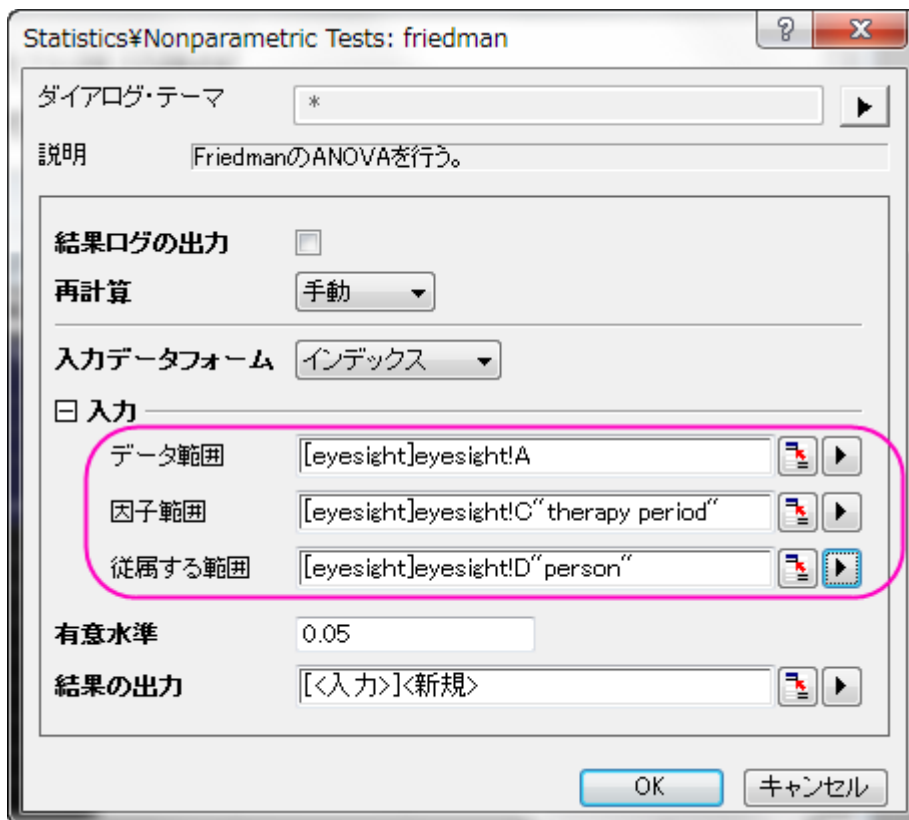
帰無仮説: 標本は同じ母集団から来た。
 対立仮説: 標本は異なる母集団から来た。
 : 検定水準0.05で、これらの母集団は有意に相異なります。

複数の関連する集団検定

眼科医がヘリウム・ネオンレーザー治療が子供に有効か調べています。6-10歳の子供たちの集団と11-16歳の子供たちの2集団からのデータがあります。各データセットは5人の裸眼視力が3回の治療を通してどのように変わったのか記録しています。結果は eyesight.dat に保存されています。

標本数が少ないのでノンパラメトリック検定を行います。次の手順に沿って操作してください。

1. \Samples\Statistics\から eyesight.dat ファイルをインポートします。
2. メニューから統計:ノンパラメトリック検定:Friedman の ANOVA と選択し、friedman ダイアログを開きます。
3. 列 A をデータ範囲、列 C を因子範囲、列 D を従属する範囲として設定します。



4. OK ボタンをクリックし、結果を出力します。

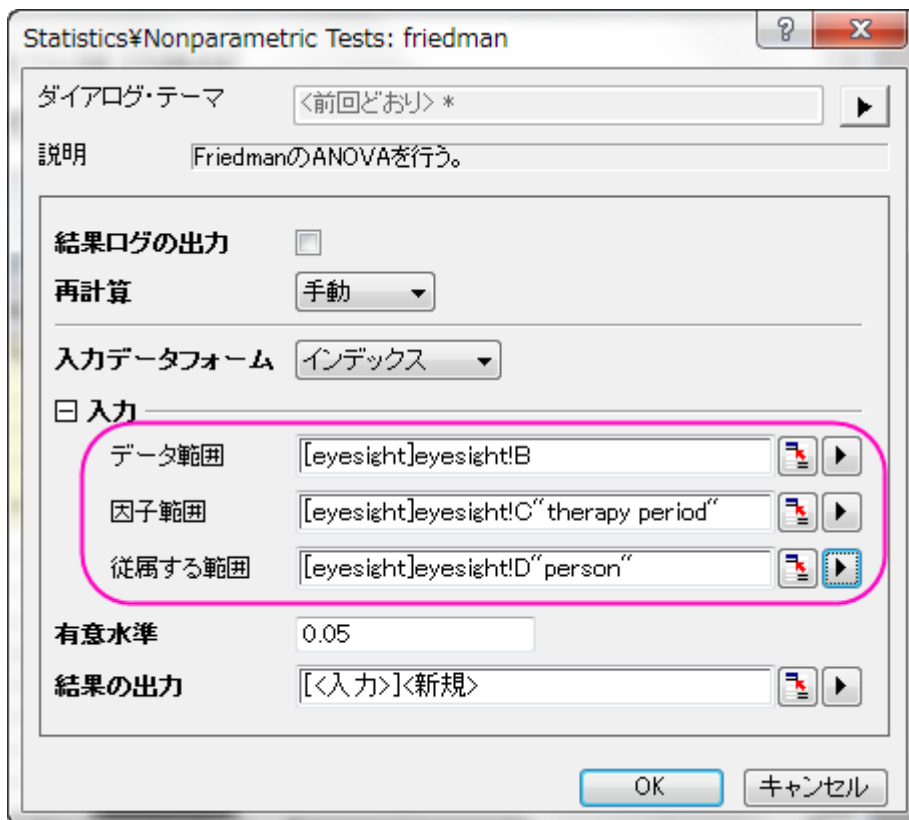
$\chi^2_{(2)}$ の p 値は 0.0067379 となっており、0.05 よりも小さい値になっています。この 2 集団は大きく異なる事が分かるので、治療は 6-10 歳の集団には有効であるといえます。

検定統計

カイニ乗	DF	Prob>カイニ乗
10	2	0.00674

帰無仮説: 標本は同じ母集団から来た。
 対立仮説: 標本は異なる母集団から来た。
 検定水準 0.05 で、母集団は有意に相異なっています。

同じように、列 B をデータ範囲にして、他の入力設定はステップ 3 と同じようにします。



結果を確認すると、 $\chi^2_{11,0.16}$ の p 値は 0.02599 となっており、0.05 や 0.10 よりも小さくなっていることが分かります。つまり、11-16 歳までの子供でも、3 回の治療で視力が良くなっていると結論づける事ができます。

□ 検定統計

カイ二乗	DF	Prob>カイ二乗
7.3	2	0.02599

帰無仮説: 標本は同じ母集団から来た。
 対立仮説: 標本は異なる母集団から来た。
 検定水準0.05で、母集団は有意に相異なっています。

また、 $\chi^2_{6,0.10} > \chi^2_{11,0.16}$ という事が分かるので、ヘリウム・ネオンレーザー治療は 6-10 歳までの子供の方が良く効くといえます。まだ年齢が幼い子供たちがこの治療を行うと、視力が改善する可能性が高くなります。

5.5. 生存分析

5.5.1. カプランマイヤー推定法

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ステップ](#)
 - [3.1 Kaplan-Meier 法の実行](#)
 - [3.2 結果の解釈](#)

サマリー

生存分析は、実験中の死亡や措置の失敗などのあるイベントに至るまでの時間を分析するものです。社会科学ではイベントヒストリー分析、工学では信頼性解析と呼ばれています。

生存関数 $S(t)$ は、時間 t までの間の生存確率として表します。 $S(t)=1-F(t)$ では、 $F(t)$ は失敗(イベント)時間の累積分布関数です。ハザード関数 $h(t)$ (他に、故障率、ハザード比、致死力とも呼ばれています)は確率面積関数の $P(t)$ の $F(t)$ から生存関数比率 $S(t)$ を表しています。

カプランマイヤー法または積極限推定法は、徐々に打ち切られる故障時間の標本データから $S(t)$ の推定値を提供します。

必要な Origin のバージョン:8.0 SR6

学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- Kaplan-Meier 推定を実行します。
- 結果の解釈方法

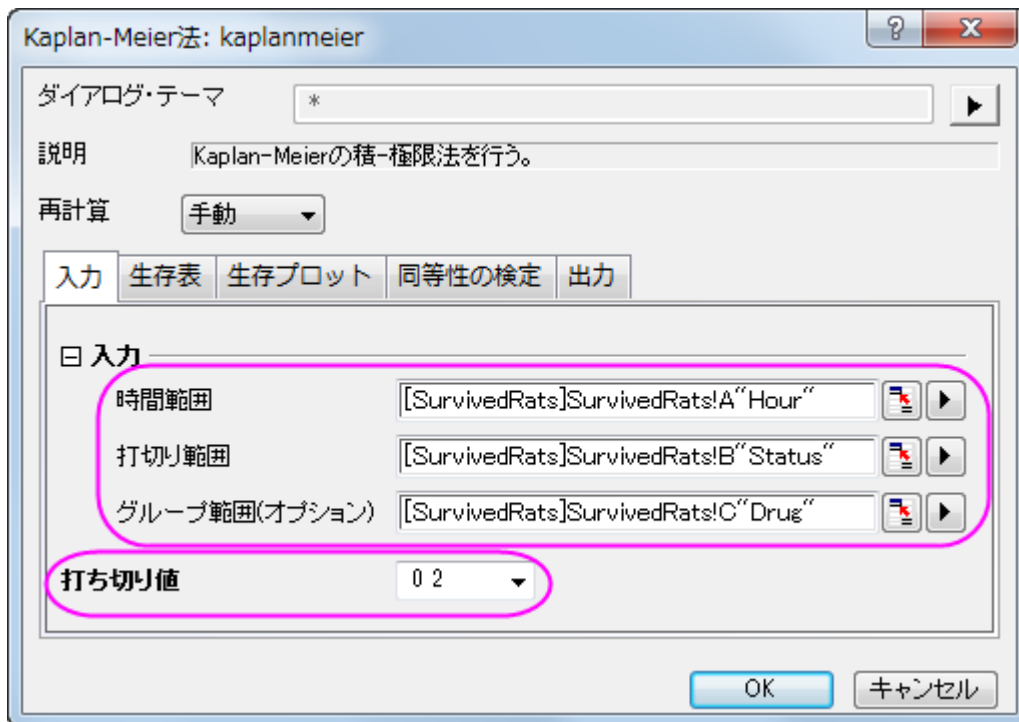
ステップ

Kaplan-Meier 推定を実行

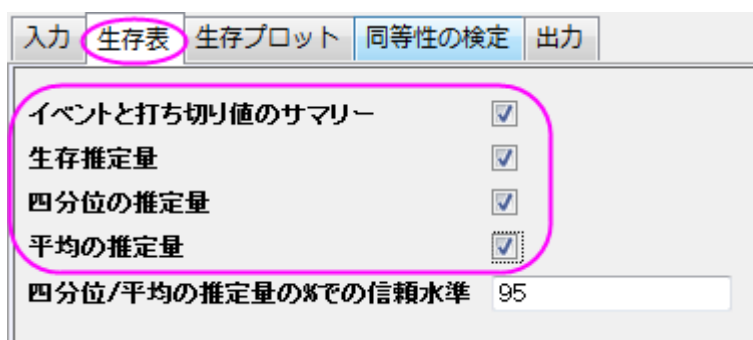
科学者がより良い抗ガン剤を探しているものとします。いくつかのラットに発ガン物質 DMBA を与えた後、異なるラットのグループに異なる薬を投与し、最初の 60 時間の生存状況を記録します。最初のグループには、Medicine 1 を投与した 15 匹のラットが生存しています。30 時間後、1 匹のラットが死亡しましたが発ガン物質によるものではありませんでした。2 番目のグループでは、drug 2 を投与した 15 匹のラットが生存しています。14 時間後、15 時間後、25 時間後にそれぞれ 1 匹ずつラットが死亡しましたが、発ガン物質によるものではありませんでした。この 2 つのグループの結果は `/Samples/Statistics/SurvivedRats.dat` に保存されています。Status は、0 = 死亡(発ガン物質によるものではない)、1 = 死亡(発ガン物質による)、2 = 生存です。

1. 単一 ASCII インポート  をクリックして `/Samples/ Statistics/ SurvivedRats.dat` をインポートします。

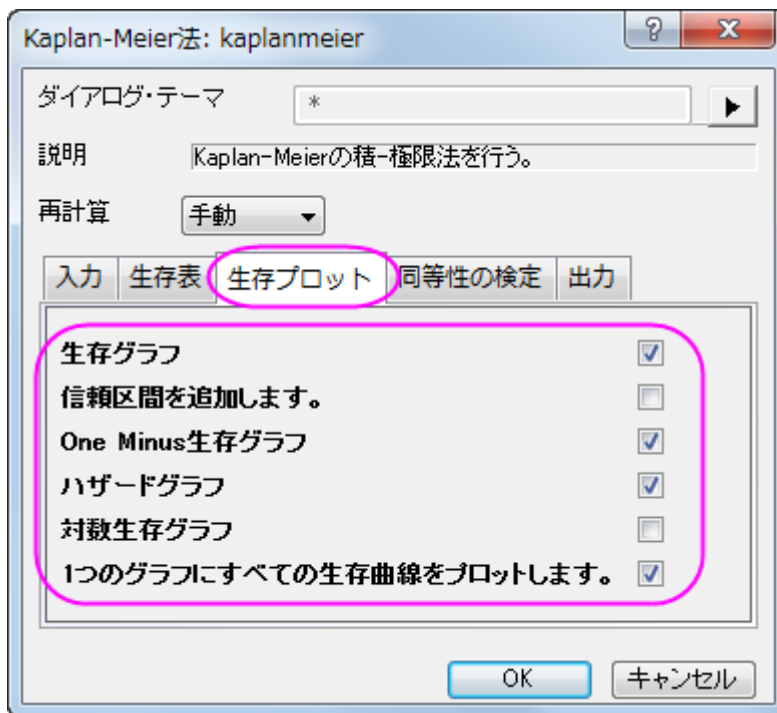
2. カプランマイヤー推定法をつかってデータセットを分析します。メニューから「統計:生存分析:Kaplan-Meier 法と選択してダイアログを開きます。
3. 列 A, B, C をそれぞれ入力ブランチ内の時間範囲, 打ち切り範囲, グループ範囲 にセットします。
4. 0 と 2 を 打ち切り値 にセットします。



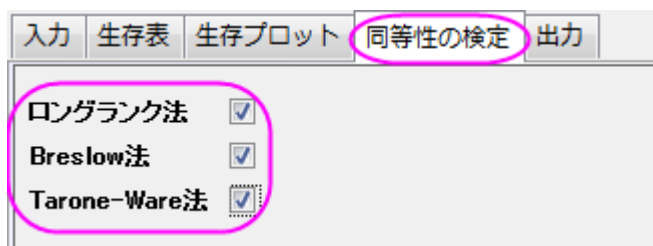
5. 生存表グループでは、イベントと打ち切り値のサマリー、生存推定量、四分位の推定量、平均の推定量のチェックを付けます。



6. 生存プロットタブでは、One Minus 生存グラフ、ハザードグラフのチェックを付けます。



7. SA 関数の等価性の検定グループのログランク法のチェックボックスにチェックを付けます。



8. OK ボタンをクリックします。

結果の解釈

分析結果が出力した **KaplanMeier1** ワークシートを開きます。

- 「イベントと打ち切り変数のサマリー表」では、drug1 のグループでは打ち切り=3 で打ち切りパーセントは 0.2 に、drug2 のグループでは打ち切り=9 で打ち切りパーセントは 0.6 になりました。

イベントと打ち切り変数のサマリー

	合計	イベント	打ち切り	打ち切りパーセント
drug1	15	12	3	0.2
drug2	15	6	9	0.6

打ち切り値: 0.2

- 「Kaplan-Meier 生存推定」表では時間対イベントの変数の分布をみるための設定手順を表示します。因子のレベルごとに分布を比較する事もできます。四分位推定と平均推定の表は四分位と平均について信頼区間付きの推定値を提供します。

時間の生存分析 (drug1)

Kaphan-Meier生存推定

時間	ステータス	累積生存	標準誤差	累積イベント	残りの数
14		0.93333	0.06441	1	14
15		--	--	2	13
15		0.8	0.10328	3	12
17		--	--	4	11
17		0.66667	0.12172	5	10
20		0.6	0.12649	6	9
21		0.53333	0.12881	7	8
23		0.46667	0.12881	8	7
30	+	--	--	8	6
32		0.38889	0.1287	9	5
38		0.31111	0.12426	10	4
42		0.23333	0.11499	11	3
58		0.15556	0.09955	12	2
60	+	--	--	12	1
60	+	--	--	12	0

+状態の観測値は打ち切りとなっているものです。

四分位推定

パーセント失敗	推定	95% LCL	95% UCL
25	17	15	23
50	23	17	42
75	42	23	58

平均推定

推定	標準誤差	95% LCL	95% UCL
32.02222	4.53441	23.13494	40.9095

最大の観測値が打ち切りとなっているため、推定が過小評価されています。

時間の生存分析 (drug2)

Kaplan-Meier生存推定

時間	ステータス	累積生存	標準誤差	累積イベント	残りの数
14	+	--	--	0	14
15	+	--	--	0	13
17		0.92308	0.07391	1	12
23		0.84615	0.10007	2	11
25	+	--	--	2	10
28		--	--	3	9
28		0.67692	0.13366	4	8
36		0.59231	0.14122	5	7
60		0.50769	0.14418	6	6
60	+	--	--	6	5
60	+	--	--	6	4
60	+	--	--	6	3
60	+	--	--	6	2
60	+	--	--	6	1
60	+	--	--	6	0

+状態の観測値は打ち切りとなっているものです。

四分位推定

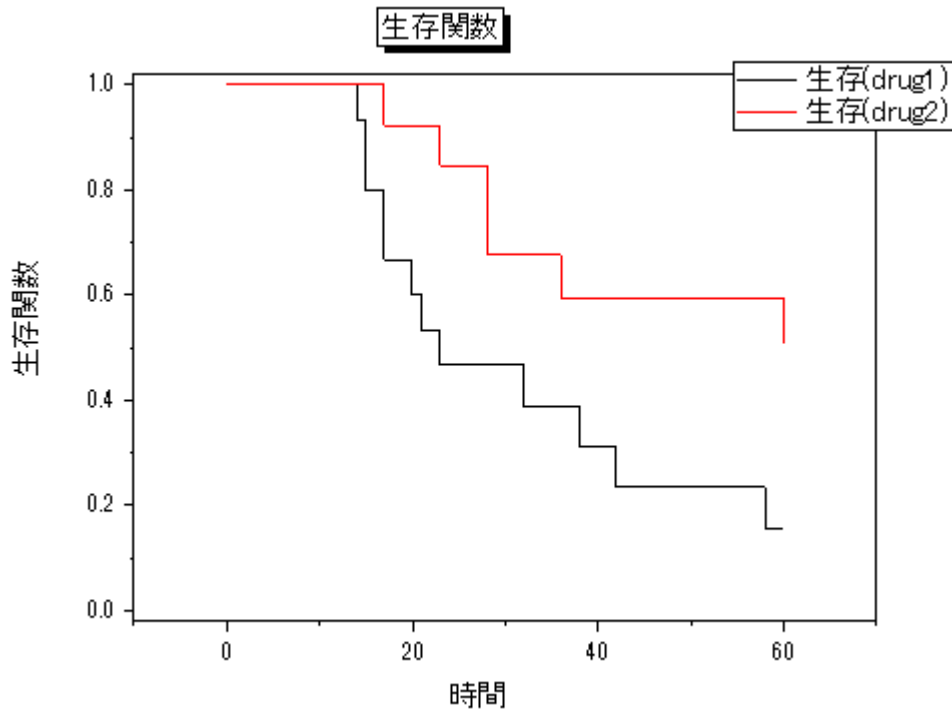
パーセント失敗	推定	95% LCL	95% UCL
25	28	23	60
50	--	--	--
75	--	--	--

平均推定

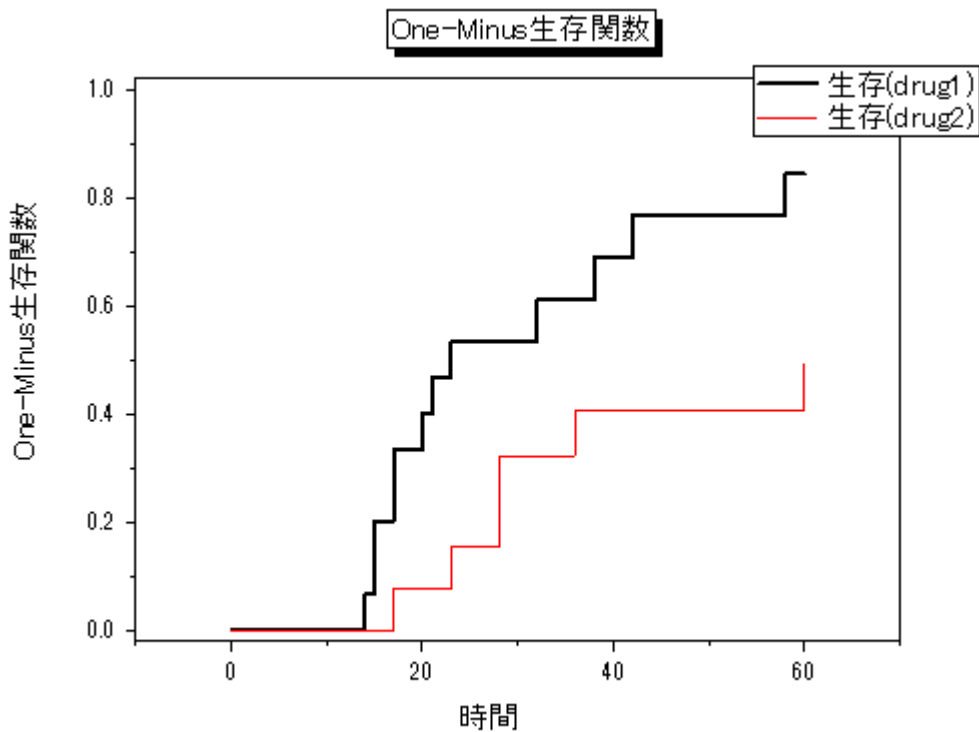
推定	標準誤差	95% LCL	95% UCL
46.4	5.26463	36.08152	56.71848

最大の観測値が打ち切りとなっているため、推定が過小評価されています。

3. 生存曲線では生命表を視覚的にとらえる事ができます。生存関数の Kaplan-Meier 推定を元にしたプロットは、水
平なステップの繰り返しで徐々に大きさが少なくなっていきます。プロット内でより生存曲線の減少が急なものほど
生存確率は小さくなります。生存関数プロットは drug1 と drug2 のグループで、1 時間ごとにどれぐらいの個体が生
存していたかを示しています。drug1 のグループの減少率の方が急なので、drug2 の方が抗ガン剤としてよいとい
えます。

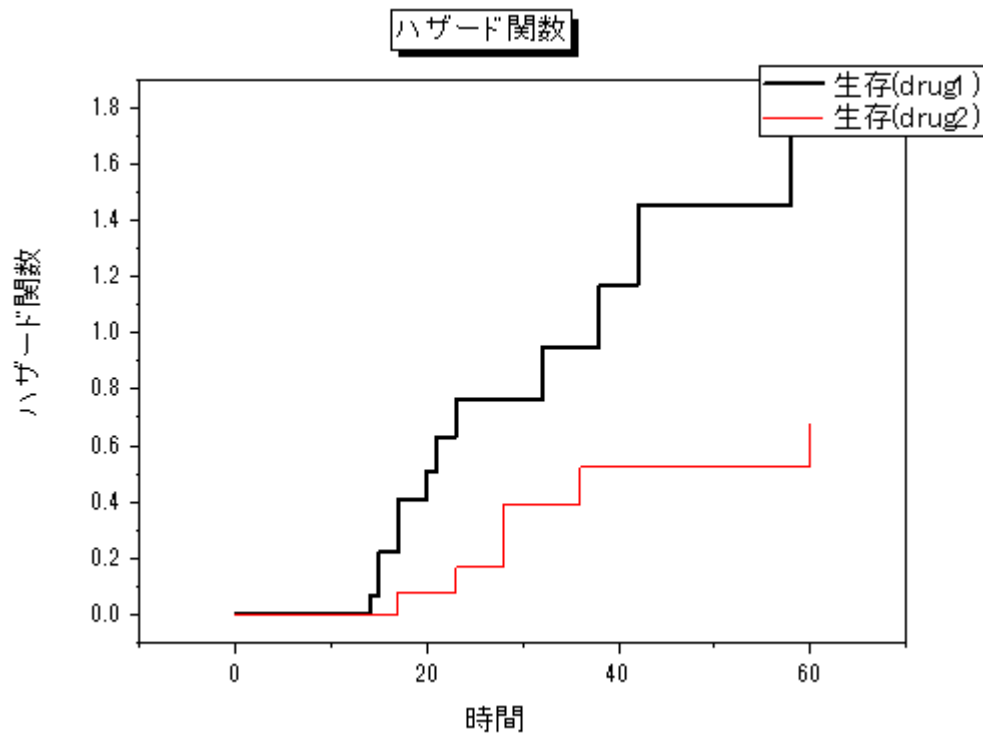


4. One Minus 生存関数から、生存関数プロットと同じ結果を得る事ができます。



5. ハザード比率は目的のイベントがその時間内に起こる瞬間的な確率です。X 軸に時間を割り振った状態で作成してハザード比率対時間のグラフを作成します。ハザード関数はこの曲線を説明する関数です。グラフより、drug1 のハ

ザード率は drug2 のハザード率よりも大きいことがわかります。よって、drug2 の方がよりよい抗ガン剤であると結論付ける事ができます。



6. 全体のグループ間の等価性の検定では、Origin は 3 つの手法を提供しています。

- ロングランク法:生存関数の等価性を、全ての時間を同じ重み付けで検定します。
- Breslow 法:生存関数の等価性を、全ての時間ポイントをリスクのある事例の数で重み付けしています。
- Tarone-Ware 法生存関数の等価性を、全ての時間ポイント平方根でリスクのある事例の数で重み付けしています。

グループ間の等価性の検定

	カイ二乗	df	Prob>カイ二乗
対数ランク	4.73554	1	0.02955
Breslow	4.91804	1	0.02658
Tarone-Ware	4.89582	1	0.02692

検定の信頼区間は 0.05 よりも小さな値となっているので、2 つの処方(drug1 と drug2)では生存時間は統計的に有意に異なる事をいう事ができます。

5.5.2. COX モデル推定法

サマリー

COX モデル推定法、または比例ハザードモデルは、生存分析において典型的な半パラメータ手法です。COX モデル推定法は各対象に対して生存する際の変数の影響や死の危険に対して推定します。COX 回帰分析から、生存変数に対する関数として危険の数式を求めます。説明変数の正の回帰係数はその変数の値が大きくなると、危険がより高くなることを意味しています。説明変数が負の回帰係数を持つ場合は、その変数の値が大きくなると危険が低くなります。

比例ハザードの仮定は次の通りです。観測結果は独立で、ハザード比率は全ての時間で等しい必要があります。つまり、1つの出来事に関するハザード比率と他の出来事では、時間の経過と共に変化しない事が仮定されています。


必要な Origin のバージョン:8.0 SR6

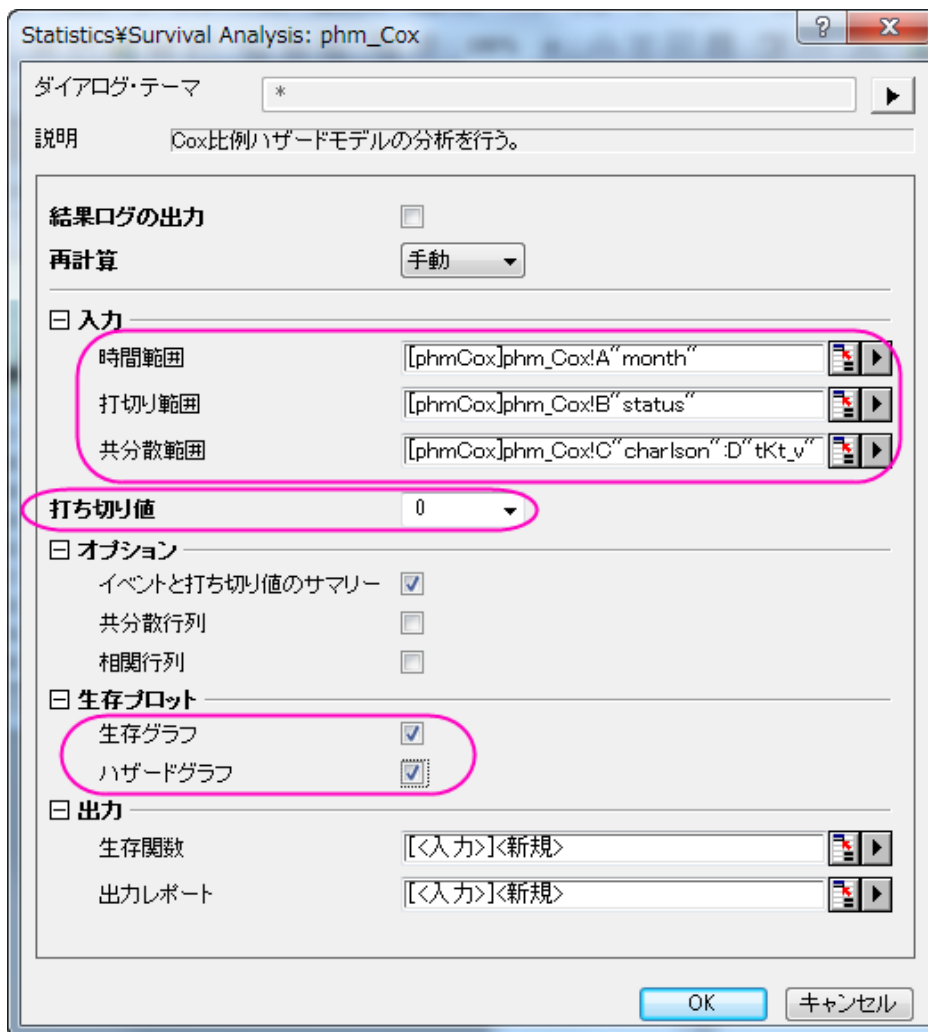
学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

- COX モデル推定法を実行
- 結果の解釈方法

COX モデル推定法を実行

1. 単一 ASCII インポート  をクリックして **\Samples \Statistics** サブフォルダ内の **phm_Cox.dat** をインポートします。
2. メニューから **統計:生存分析:COX 比例ハザードモデル** と選択し、ダイアログを開きます。
3. **A(X):month** 列を **時間範囲** にセットします。同じように、**打ち切り範囲** に **B(Y):status** をセットします。
4. ワークシートから **選択ボタン** をクリックして、「**共分散範囲**」ボックスでは **Charlson** と **tKt_v** 列を選択します。
5. 打ち切り値のドロップダウンリストから **0** を選びます。
6. 「**生存プロット**」グループでは、**生存グラフ** と **ハザードグラフ** のチェックを付けます。
7. **OK** ボタンをクリックして、Cox 比例ハザードモデル分析を実行します。



結果の解釈

分析結果が出力した **CoxPHM1** ワークシートを開きます。

1. 「イベントと打ち切り変数のサマリー」表から、**打ち切り**は 112 で**打ち切りパーセント**は 0.8 である事がわかります。

合計	イベント	打ち切り	打ち切りパーセント
140	28	112	0.8

打ち切り値: 0

2. 以下の表はこのモデルが有意かどうかを示しています。帰無仮説は $\beta_1 = \beta_2 = 0$ となります。この例では、**Pr > ChiSq** = $4E(-4) < 0.05$ となるので、帰無仮説を棄却します。つまり、最低 $\beta_i \neq 0$ ($i=1,2$)が成立します。

-2 Log Likelihood	カイ二乗	DF	Pr > ChiSq
239.8598	15.5649	2	4E-4

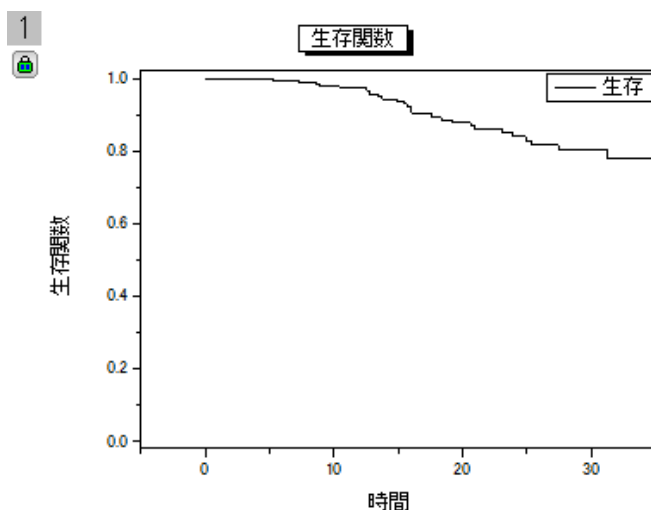
棄却せずに反復の限界に達しました。
モデルの適合度の妥当性には疑問があります。

3. 「パラメータ推定の解析」では、charlson の推定係数は 0.2876 となり、 $Pr > ChiSq = 5E-4 < 0.05$ となります。よって、 $\beta_1 = 0.287$ は有意に異なる charlson 変数になります。ハザード比率は予測因子が 1 単位増えるときの推定変化として読み取る事ができます。charlson 変数に関してはハザード比=1.333 なので、charlson が 1 単位増えるとハザードは 1.333 倍になる事になります。同じように、tKt_v は有意変数です。tKt_v の推定係数は $\beta_2 = -0.837$ となり、ハザード比は 0.433 となります。これから、ハザード関数、 $h(t,x) = h_0(t) \cdot \exp(0.2876 \cdot charlson - 0.837 \cdot tKt_v)$ が分かります。

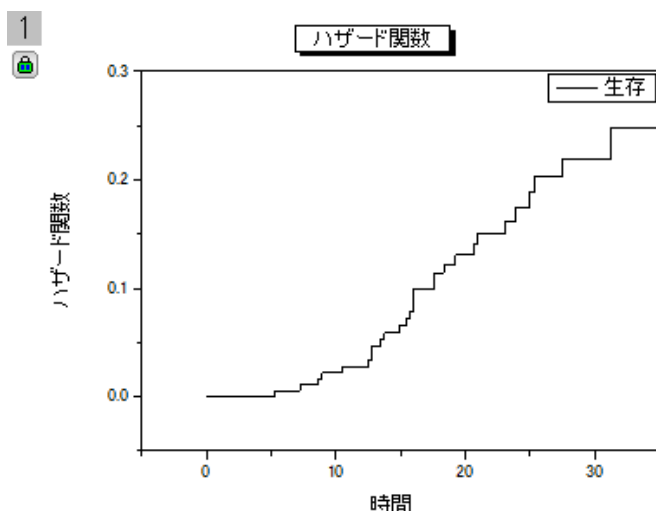
パラメータ推定の解析

	DF	推定	標準誤差	カイ二乗	Pr > ChiSq	ハザード比
"charlson"	1	0.2876	0.0827	12.0856	5E-4	1.3333
"tKt_v"	1	-0.837	0.3445	5.9032	0.0151	0.433

4. 生存関数プロットは各時間で生存している個体数を表示し、推定したモデルを視覚的に表示しています。水平の軸はイベントまでの時間を示します。垂直の軸は生存する確率を示します。



5. ハザード関数プロットは、イベントがその瞬間に起こる確率をグラフで表しています。





5.5.3. ワイブルフィット

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 ワイブルフィットを実行](#)
- [4 結果の解釈](#)

サマリー

ワイブルフィットは、生存関数と故障時間間の関係を分析するパラメータ法の 1 つです。分析の後、パラメータの推定値を求める事ができ、これからワイブルフィットの生存関数とハザード関数を求める事ができます。

ワイブル分布:

$$f(x) = \frac{c}{\sigma} \left(\frac{x - \theta}{\sigma} \right)^{c-1} \exp\left(- \left(\frac{x - \theta}{\sigma} \right)^c\right) \quad \text{ここで } c, \sigma > 0 \text{ のとき, } x > \theta$$

生存関数:

$$S(x) = \exp\left(- \left(\frac{x - \theta}{\sigma} \right)^c\right)$$

ハザード関数:

$$h(x) = \frac{c}{\sigma} \left(\frac{x - \theta}{\sigma} \right)^{c-1}$$

ここで、 c は形状パラメータ、 σ はスケールパラメータ、 θ は位置パラメータです。Origin では、Origin では Weibull fit は c と σ についてのみ議論し、 $\theta = 0$ と仮定します。

$c > 1$ の場合、ハザードは増加し、 $c = 1$ の場合、ハザードは定数(指数モデル)、 $c < 1$ の場合、ハザードは減少します。


必要な Origin のバージョン: Origin 9.1 SR0

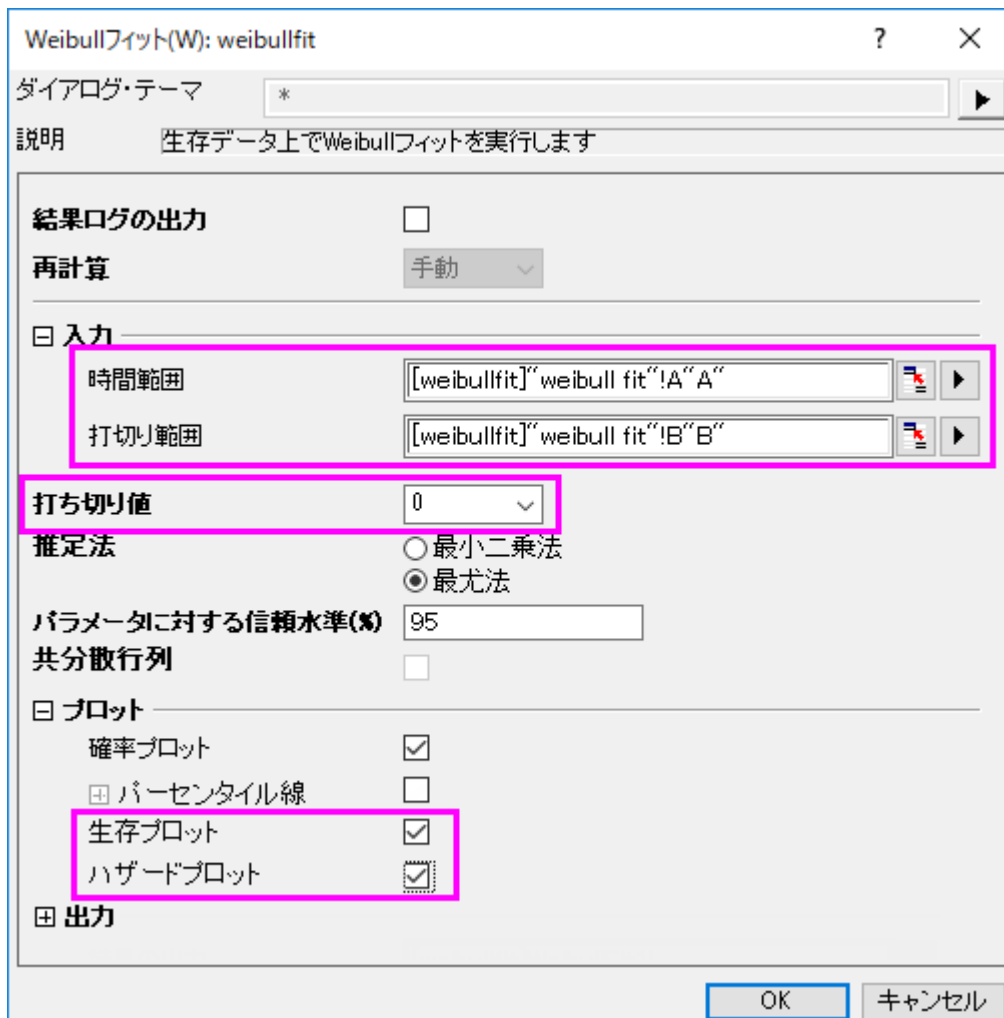
学習する項目

このチュートリアルでは、以下の項目について解説します。

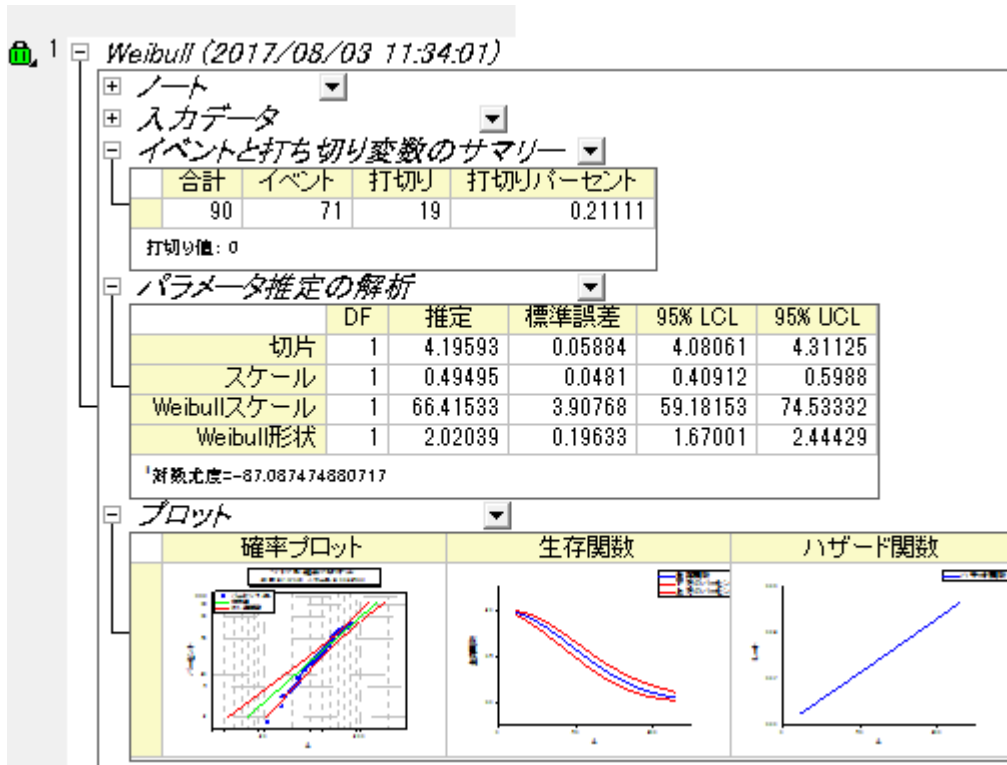
- ワイブルフィットを実行する
- 分析レポートを解説する

ワイブルフィットを実行する

1. 単一 ASCII インポート  をクリックして **Samples \Statistics** サブフォルダ内の **weibull fit.dat** をインポートします。
2. メニューから **統計:生存分析:weibull フィット** と選択し、ダイアログを開きます。
3. **A(X)**列を **時間範囲** にセットします。同じように、**打ち切り範囲** に **B(Y)**列をセットします。
4. 打ち切り値のドロップダウンリストから **0** を選びます。
5. **プロット** の項目で、**生存プロット** と **ハザードプロット** にチェックを付けます。



6. OK ボタンをクリックして、Weibull フィット分析を実行します。



結果の解釈

分析結果が出力した WeibullFit1 ワークシートを開きます。

- 「イベントと打ち切り変数のサマリー」表から、打ち切りは 19 で打ち切りパーセントは 0.2111 である事がわかります。

イベントと打ち切り変数のサマリー

合計	イベント	打ち切り	打ち切りパーセント
90	71	19	0.21111

打ち切り値: 0

- 「パラメータ推定の解析」の表では、Weibull 分布の全てのパラメータの推定値を入手できます。切片= $\theta=4.1959$ (θ は小さな極値分布の切片、 $\theta = \ln(\text{Weibull Scale})$)
 Weibull スケール= $\sigma=66.4153$, Weibull 形状= $c=2.0204$
 スケール= 0.495 (scale= $1 / c$)

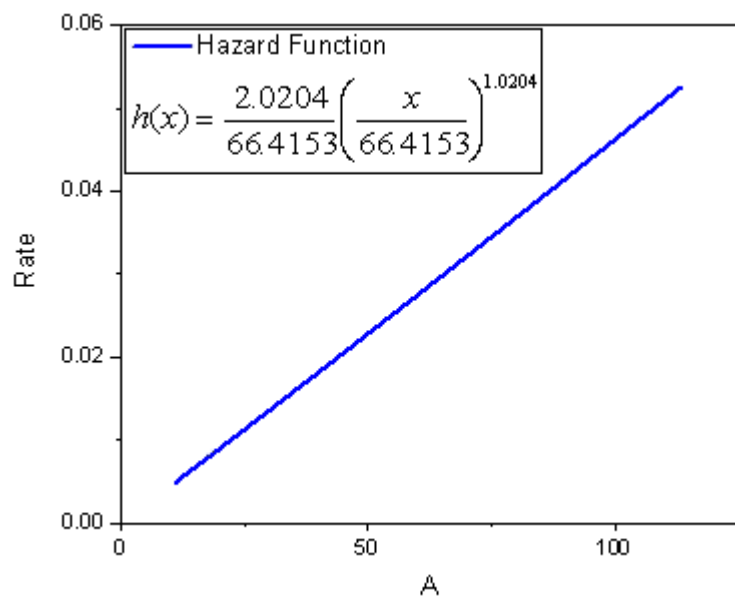
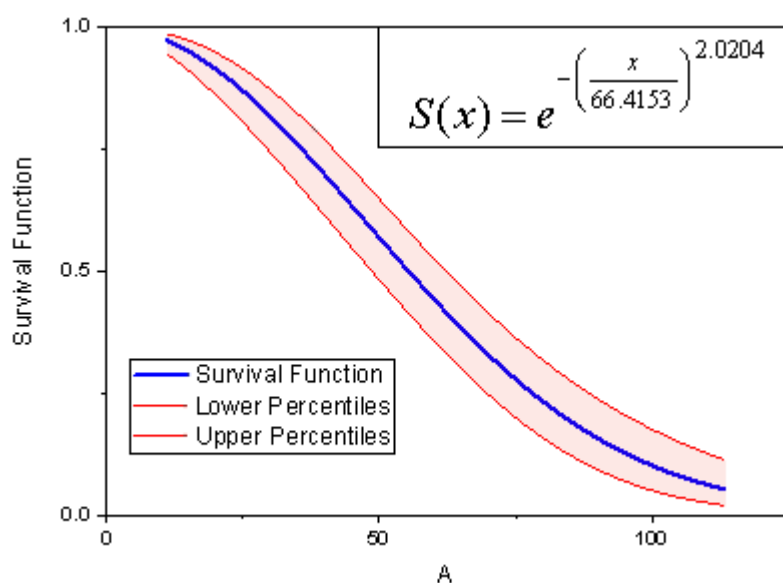
パラメータ推定の解析

	DF	推定	標準誤差	95% LCL	95% UCL
切片	1	4.19593	0.05884	4.08061	4.31125
スケール	1	0.49495	0.0481	0.40912	0.5988
Weibullスケール	1	66.41533	3.90768	59.18153	74.53332
Weibull形状	1	2.02039	0.19633	1.67001	2.44429

対数尤度=-87.087474880717

c > 1 なので、ハザードは時間と共に増加すると結論付ける事ができます。

- さらに、生存関数とハザード関数を求める事もできます。



5.6. 多変量解析

5.6.1. 主成分分析

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 メソッドを選ぶ](#)
- [3 主成分プロットを作成する](#)
- [4 結果の解釈](#)

サマリー

主成分分析は多変量の大きなデータセットの数を減らし、根底にある線形構造やそれまで思いもよらなかった関係性を発見するのに役立ちます。

ヨーロッパの 25 か国で 9 品目に対しタンパク質摂取量を測ったデータを使います。主成分分析を通してタンパク質の元とヨーロッパの国々との関係を見ていきたいと思います。

必要な Origin のバージョン: Origin 8.6 SR0

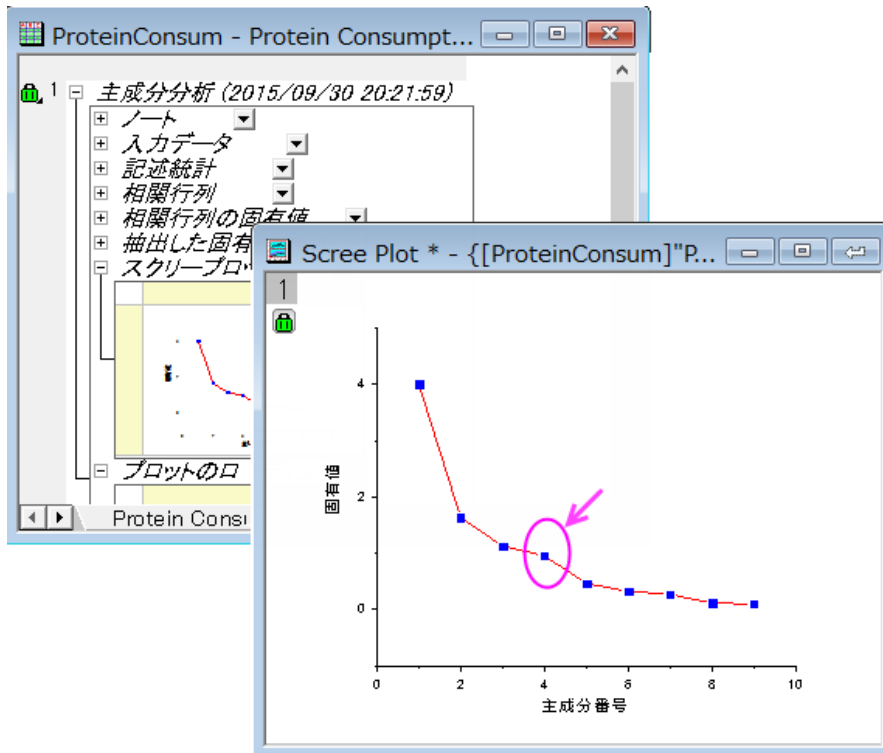
メソッドを選ぶ


どの主成分を残しておくか決めるために、まず主成分分析を行い、その結果から判断します。

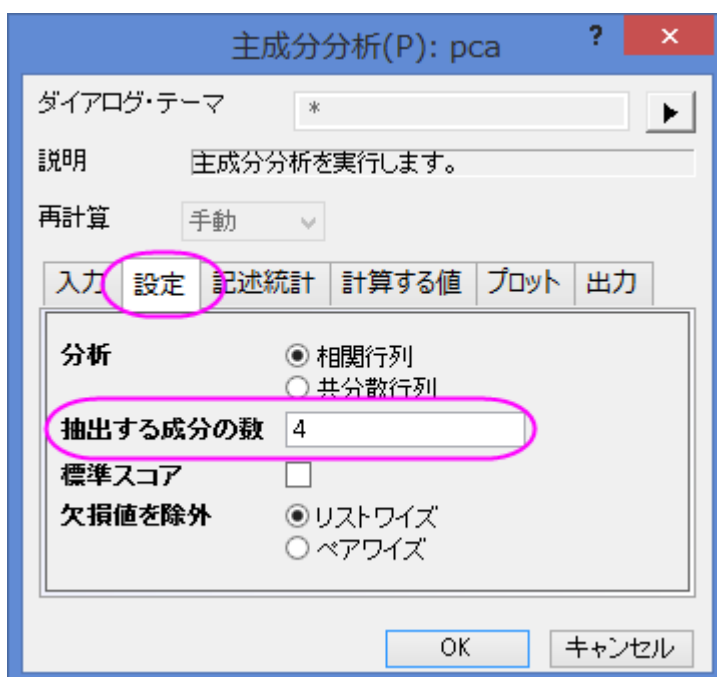
1. 新しいプロジェクトまたは新しいワークブックを開きます。\\samples\Statistics\Protein Consumption in Europe.dat ファイルをインポートします。
2. ワークシート全体を選択し、メニューから**統計: 多変量解析: 主成分分析**と操作します。
3. 開いたダイアログの設定はデフォルトのままにして、**OK** をクリックします。
4. **PCA レポート**を選択します。
5. **相関行列の固有値表**から、初めの 4 つの主成分が 86% の分散を説明しており、残りの主成分はそれぞれ 5% かそれ以下の貢献度であることが分かります。よって上位 4 つの主成分を残すことにしましょう。

	固有値	寄与率	累積寄与率
1	4.00644	44.52%	44.52%
2	1.635	18.17%	62.68%
3	1.12792	12.53%	75.22%
4	0.95466	10.61%	85.82%
5	0.46384	5.15%	90.98%
6	0.32513	3.61%	94.59%
7	0.27161	3.02%	97.61%
8	0.11629	1.29%	98.90%
9	0.09911	1.10%	100.00%

6. スクリーンプロットは視覚的に主成分の的確な数を判断するのに使用出来ます。主成分の数はポイントで表わされ、“曲がり角”より下の固有値は全体への割合が小さく、全て同じぐらいの大きさになります。このスクリーンプロットの中では“曲がり角”が分かりにくくなっていますが、その中でも4つ目のポイントが今回の“曲がり角”であると言えます。



7. 結果シートの錠前のアイコン  をクリックし、パラメータを変更をコンテキストメニューから選びます。抽出する成分の数を4にします。次のステップで主成分ダイアグラムを取り込むので、ダイアログを閉じないでください。



主成分プロットを作成する

ダイアログ内のプロットブランチでは、ユーザがスクリープロットと成分プロットを作成するか、選ぶことができます。

- **スクリープロット**

スクリープロットは視覚的に主成分の的確な数を判断するのに適しています。

- **成分プロット**

成分プロットは各観測点の成分スコアおよび各変数、主成分ペアの成分ローディングを示します。ユーザはどの成分のペアをプロットするか、**主成分を選択してプロット**のグループ内から指定できます。成分プロットは以下を含みます。

- **ローディングプロット**

ローディングプロットは元の値とサブスペースの次元の関係性を示しています。変数間の関係性を理解するのに使用します。

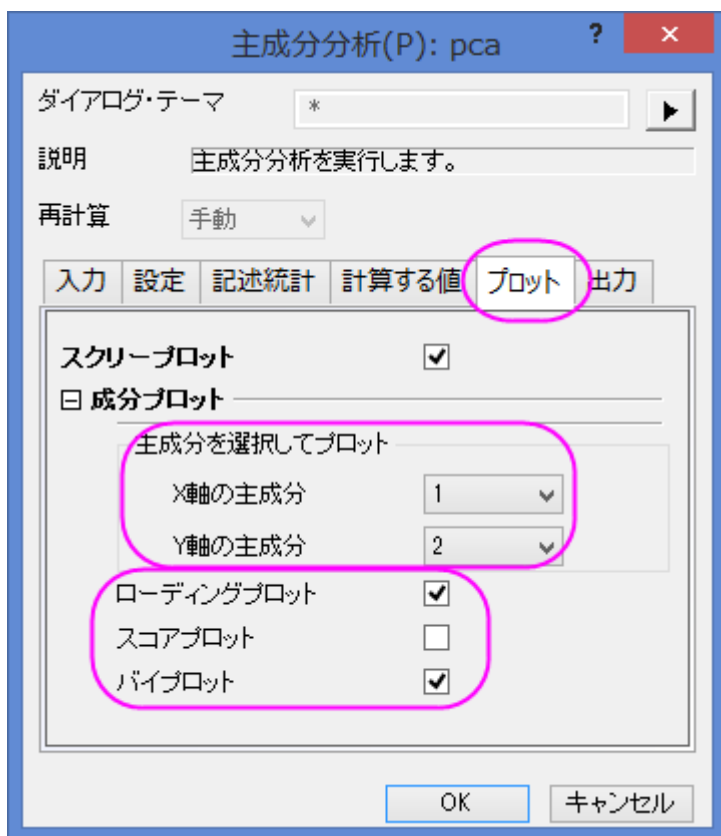
- **スコアプロット**

スコアプロットはデータをサブスペースに投影するものです。観測値間の関係を把握するのに使用します。

- **バイプロット**

バイプロットはあらかじめ選択されたローディングとスコアの成分を平行にして表示するものです。

1. 先程のステップで開いたダイアログの中で、**プロットブランチ**を開きます。ここで、**スクリープロット**、**ローディングプロット**、**バイプロット**の3つが選択されている事を確認してください。
2. 最初の2つの成分は一般的に、ほとんどの分散の割合を占めます。よって、コンポーネントプロットを初めの2つの主成分間の空間に作図することにします。**主成分を選択してプロット**グループ内では、**X軸の主成分に1**を、**Y軸の主成分には2**を選びます。**OK**をクリックします。



結果の解釈

1. 相関行列より、それぞれの数値は大きく相関していることが分かります。多くの値は **0.3** よりも大きくなっています。主成分分析は共線性を取り除くのに適している分析であるといえます。

	Red Meat	White Meat	Eggs	Milk	Fish	Cereals	Starch	Nuts	Fruits & Vegetables
Red Meat	1	0.153	0.58561	0.50293	0.06096	-0.49988	0.13543	-0.34945	-0.07422
White Meat	0.153	1	0.62041	0.28148	-0.23401	-0.4138	0.31377	-0.63496	-0.06132
Eggs	0.58561	0.62041	1	0.57553	0.06557	-0.71244	0.45223	-0.55978	-0.04552
Milk	0.50293	0.28148	0.57553	1	0.13788	-0.59274	0.22241	-0.62109	-0.40836
Fish	0.06096	-0.23401	0.06557	0.13788	1	-0.52423	0.40385	-0.14715	0.26614
Cereals	-0.49988	-0.4138	-0.71244	-0.59274	-0.52423	1	-0.53326	0.651	0.04655
Starch	0.13543	0.31377	0.45223	0.22241	0.40385	-0.53326	1	-0.47431	0.08441
Nuts	-0.34945	-0.63496	-0.55978	-0.62109	-0.14715	0.651	-0.47431	1	0.37497
Fruits & Vegetables	-0.07422	-0.06132	-0.04552	-0.40836	0.26614	0.04655	0.08441	0.37497	1

2. 主成分の値は元の値の線形(1 次的な)組み合わせによって定義されています。抽出固有ベクトル表がこの数式に対する係数を提示しています。

	主成分の係数1	主成分の係数2	主成分の係数3	主成分の係数4
Red Meat	0.30261	-0.05625	-0.29758	0.64648
White Meat	0.31056	-0.23685	0.6239	-0.03699
Eggs	0.42668	-0.03534	0.18153	0.31316
Milk	0.37773	-0.18459	-0.38566	-0.00332
Fish	0.13565	0.64682	-0.32127	-0.21596
Cereals	-0.43774	-0.23349	0.09592	-0.0062
Starch	0.29725	0.35283	0.24298	-0.33668
Nuts	-0.42033	0.14331	-0.05439	0.33029
Fruits & Vegetables	-0.11042	0.53619	0.40756	0.46206

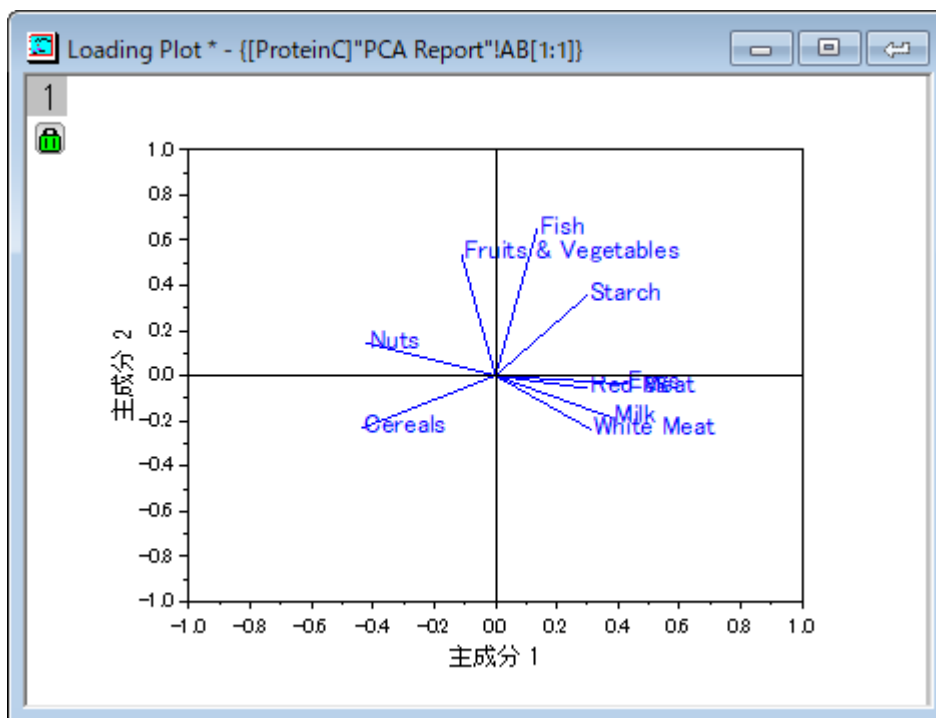
$$PC1 = 0.30261 * RedMeat + 0.31056 * WhiteMeat + 0.42668 * Eggs + 0.37773 * Milk + 0.13565 * Fish - 0.43774 * Cereals + 0.29725 * Starch - 0.42033 * Nuts - 0.11042 * FruitsVegetables$$

$$PC2 = -0.05625 * RedMeat - 0.23685 * WhiteMeat - 0.03534 * Eggs - 0.18459 * Milk + 0.64682 * Fish - 0.23349 * Cereals + 0.35283 * Starch + 0.14331 * Nuts + 0.53619 * FruitsVegetables$$


$$PC3 = -0.29758 * RedMeat + 0.6239 * WhiteMeat + 0.18153 * Eggs - 0.38566 * Milk - 0.32127 * Fish + 0.09592 * Cereals + 0.24298 * Starch - 0.05439 * Nuts + 0.40756 * FruitsVegetables$$

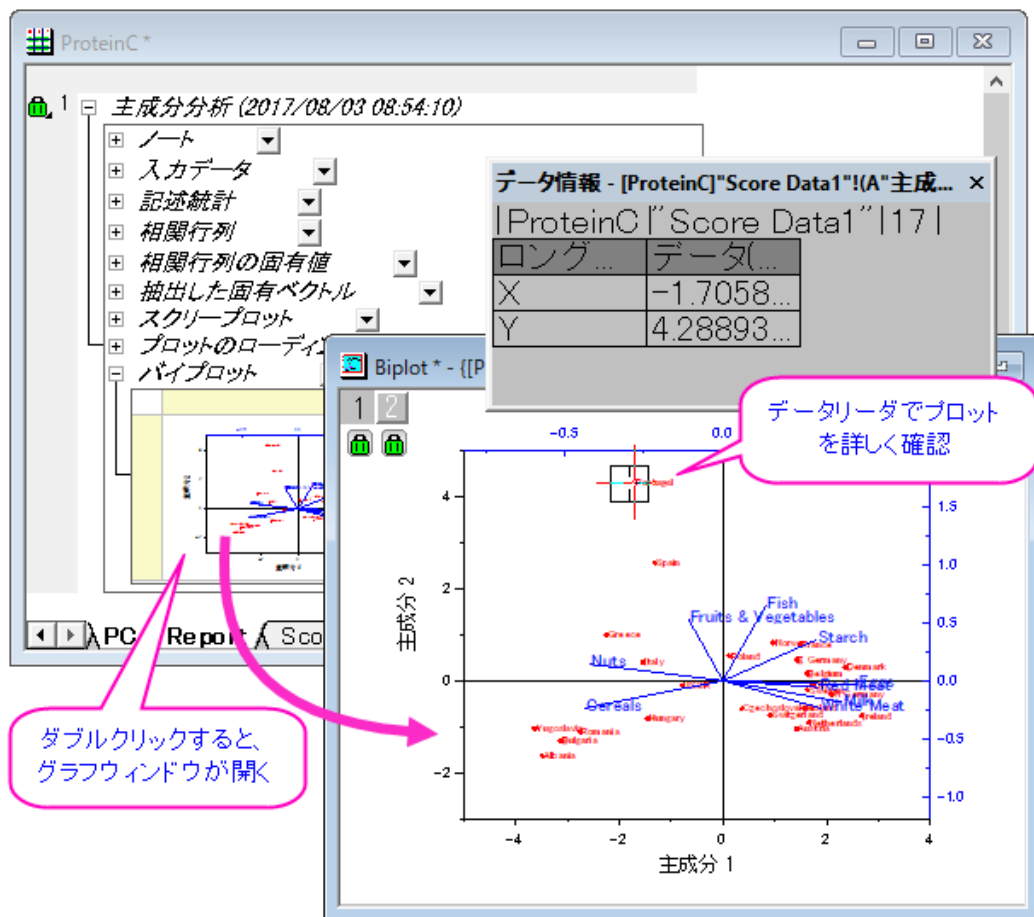
$$PC4 = 0.64648 * RedMeat - 0.03699 * WhiteMeat + 0.31316 * Eggs - 0.00332 * Milk - 0.21596 * Fish - 0.0062 * Cereals - 0.33668 * Starch + 0.33029 * Nuts + 0.46206 * FruitsVegetables$$

3. ローディングプロット(PCA1シートでは「プロットのローディング」となっています)は変数間の関係を初めの2つの成分間にある空間で表示しています。このローディングプロットでは Red Meat (赤肉)、Eggs(卵)、Milk(牛乳)、そして White Meat(白肉)は主成分1に対して同じように重い比重を持っていることが分かります。そして Fish(魚)、Fruit(果物)と Vegetables(野菜)は主成分2に対して重い比重があることが分かります。



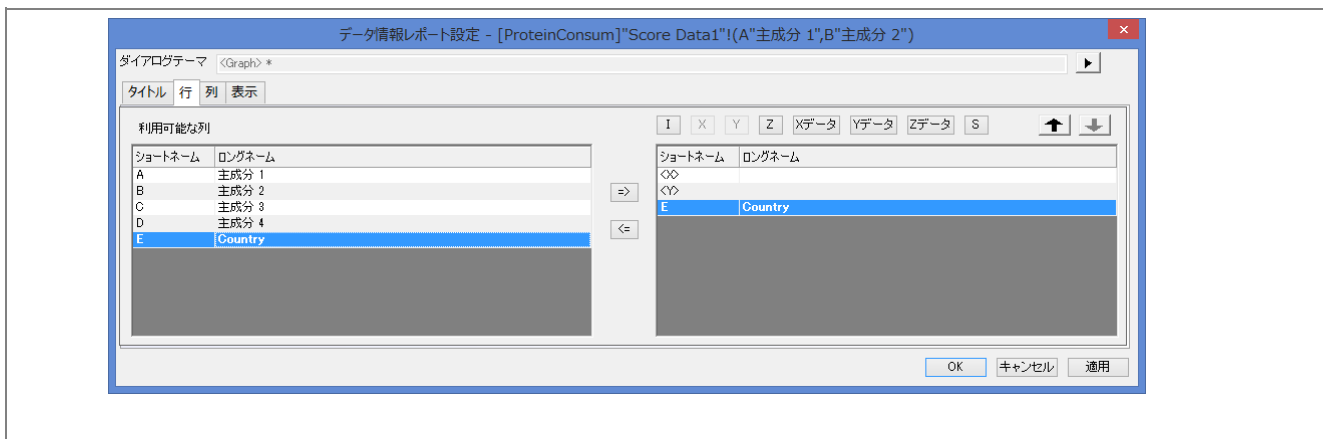
4. バイプロットはあらかじめ選択されたローディングとスコアの成分を平行にして表示するものです。これは1つの観測値の投影をサブスペースにした結果とそれぞれのスコア点を同時に表示しています。そして初めの2つのサブスペース間における観測値と変数の比率を見つけることができます。(Note: グラフをダブルクリックして開き、編集が可能です)

5. リーダツール  を使用してデータ情報ウィンドウを開き、プロットをより詳しく確認します。すると、スペインとポルトガルのタンパク源は他のヨーロッパの国々とは異なっていることが分かります。スペインとポルトガルは果物と野菜からタンパク質を得ているのに対し、東ヨーロッパの国々、例えばアルバニア、ブルガリア、ユーゴスラビア、ルーマニアでは穀類とナッツ類からタンパク質を得ています。




上記のデータ情報ウィンドウのように国名を表示するには、次のように操作してください。

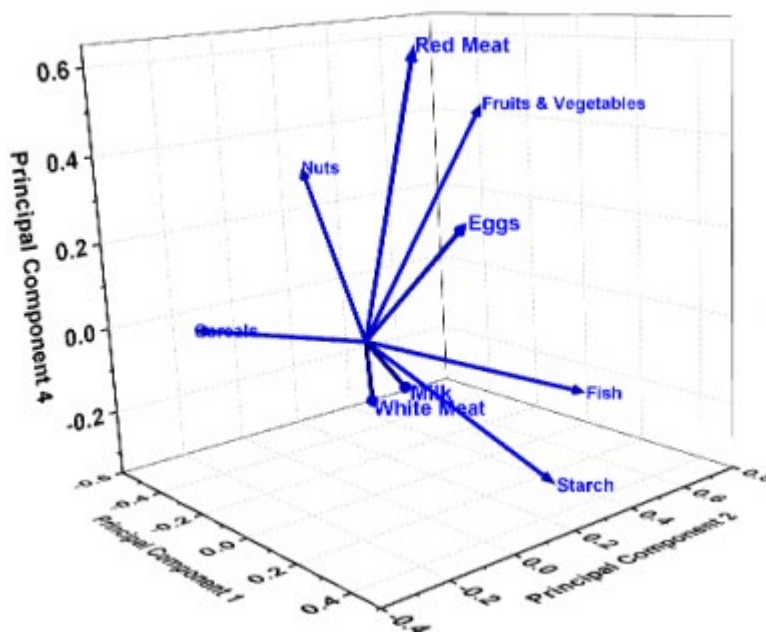
1. データ情報ウィンドウ内で右クリックし、ユーザ設定を選択します。
2. ダイアログの行タブで、"Country"を左側のパネルから右側へ移動します。OK をクリックします。



任意の 3D ローディングプロットを作成するには、PC1-PC2-PC4 or PC1-PC3-PC5 ローディングプロットのようにします。

1. 結果シートの錠前のアイコンをクリックし、**パラメータを変更**をコンテキストメニューから選びます。**セッティングタブ**で、除外するコンポーネントの数を必要に応じて設定します。例えば、PC1-PC2-PC4 ローディングプロットを行いたい場合、**抜き取るコンポーネントの数**は 4 に設定します。**OK** をクリックしてダイアログを閉じます。
2. **固有ベクトル**のテーブルの列は4つになっています。PCA Plot Data1 シートを複製するため、PCA Plot Data1 タブを選択し、右クリックして**複製**を選択します。新規シートの名前を PCA Plot Data2 のように変更します。
3. ワークブックのタイトルバーを右クリックして、**プロパティ**を選択し、ダイアログを開きます。**ウィンドウプロパティダイアログ**で、**スプレッドシートセル表記**のチェックを外します。**OK** をクリックしてダイアログを閉じます。
4. PC1-PC2-PC4 ローディングプロットをプロットしたい場合、PCA Plot Data2 シートをアクティブにし、**列E**を選択します。**列E**の前に、右クリックで列を追加します。列Gの前にも、列を追加します。新しい 2 列を選択して右クリックし、**列 XY 属性の設定:Z**を選択します。
5. H1 列と I1 列のロングネームを、**Principal Component 4**に変更します。列 Hi の固有ベクトルが 0 になるように、設定します。
6. PCA1 シートに移動し、固有ベクトルのテーブルにある **Coefficients of PC4** を選択して、PCA Plot Data2 の I1 列に貼り付けます。
7. 列C~列 I1 を選択し、メニューの**プロット:3D:ベクトル:3D ベクトル XYZ XYZ**を選択します。
8. ベクトルの色を変えたり、ラベルを追加するなどの編集も可能です。**プロットの詳細ダイアログ**を開くためにダブルクリックをします。次に、**Original**レベルに移動します。**3D ベクトルタブ**を選択し、**色を青**に、**太さを 4**に変更します。次に、**ラベルタブ**に移動し、**ラベル形式を Col(G)**、

位置を右、サイズを 20、接続先を矢印の頭にします。OK をクリックしてダイアログを閉じます。
次のように 3D ローディングプロットは作成されます。



5.6.2. クラスタ分析


サマリー

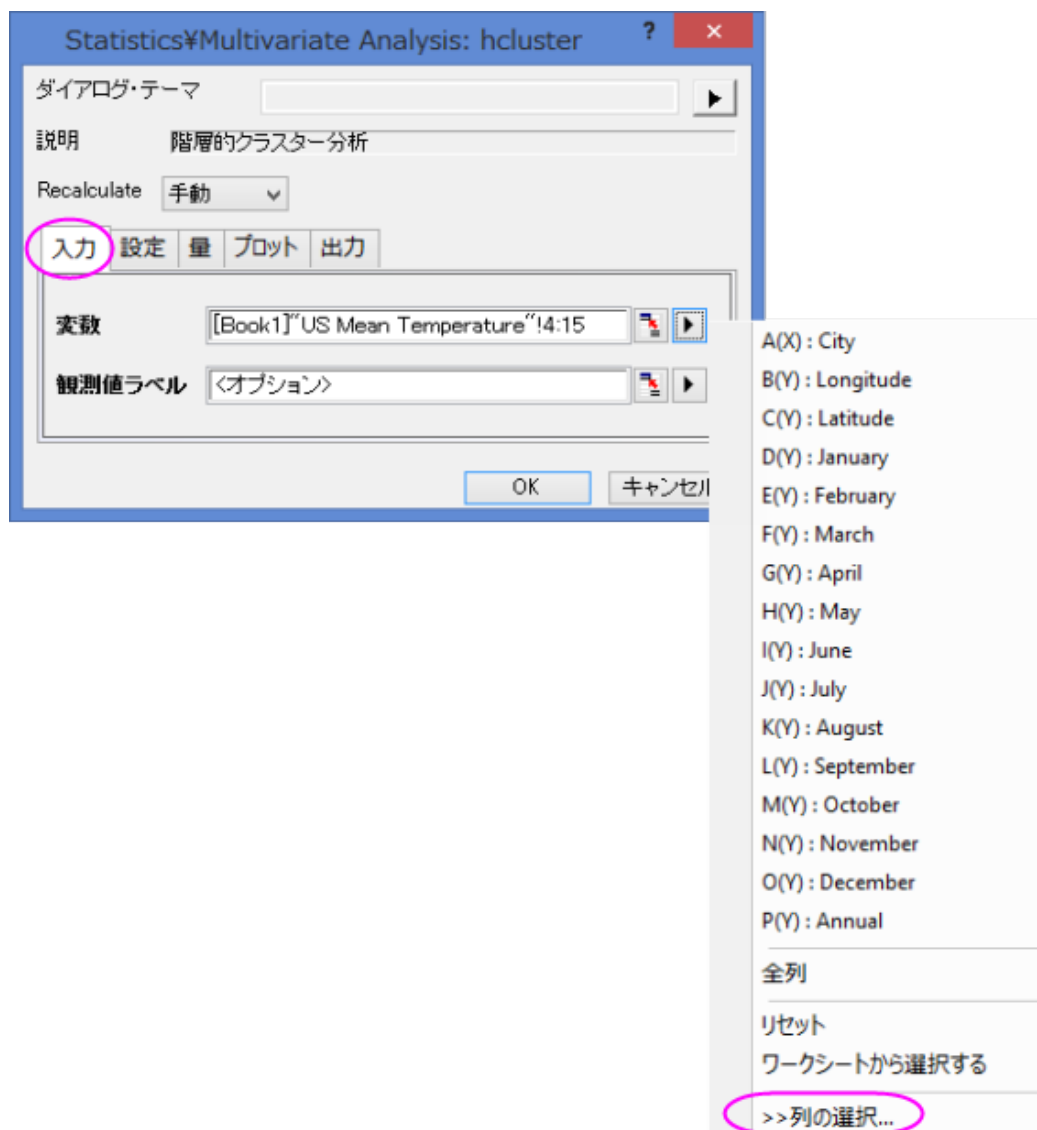
実際にアメリカの都市の過去 3 年分の平均気温を使ってクラスタ分析をしてみましょう。

まずはランダムに選択したデータを使い、階層的クラスタ分析を行って、それを元に最適なクラスタ分けを見つけたいと思います。そのあと、分析の速いクラスタ法である、K-means 法クラスタ分析を全体のデータに行います。

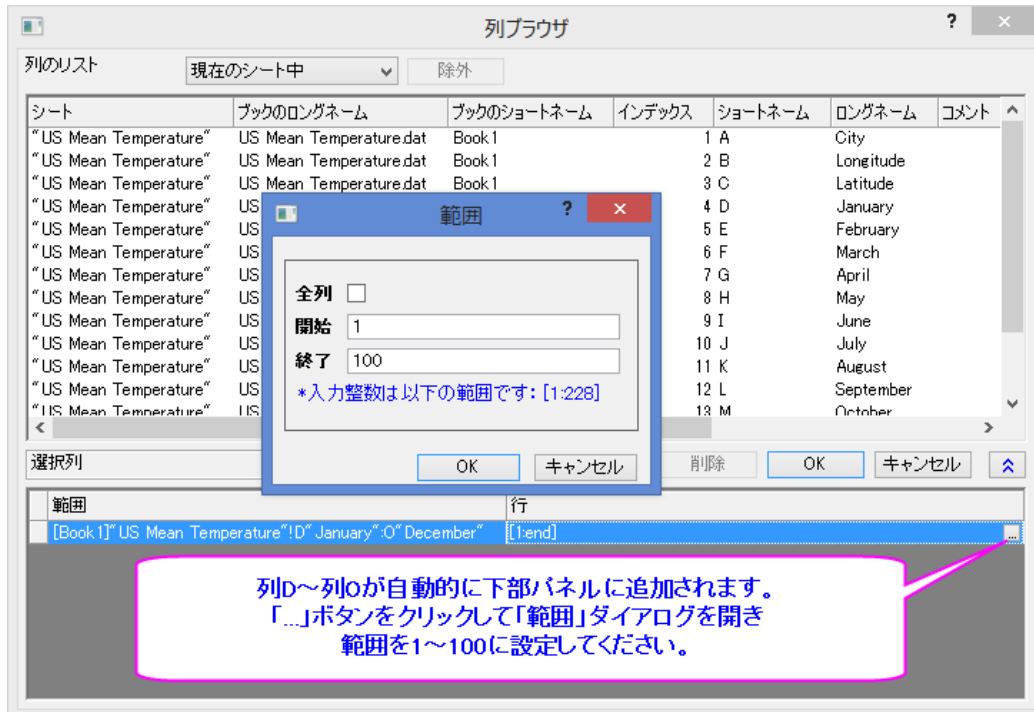
必要な Origin のバージョン: Origin 8.6 SR0

階層的クラスタ分析

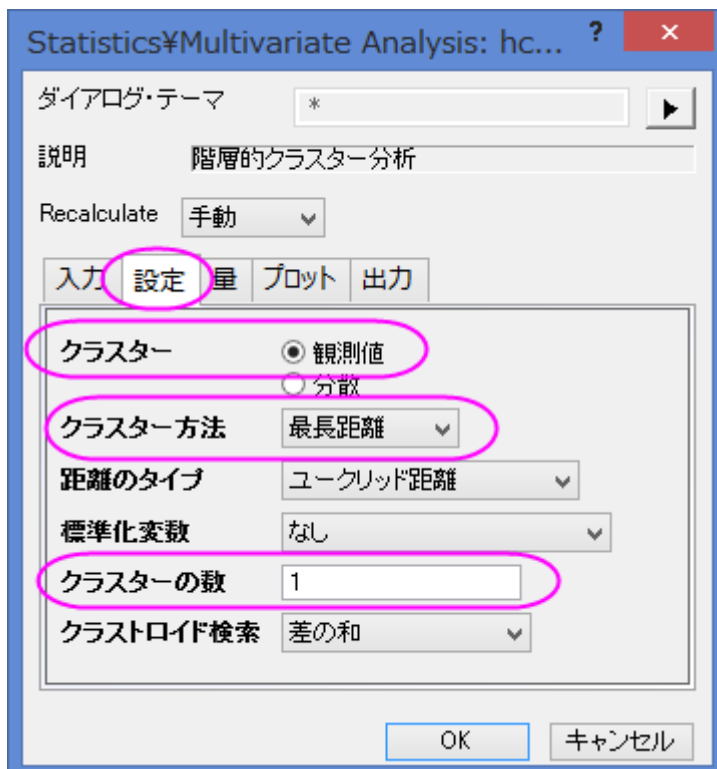
1. 新しいプロジェクトまたは新しいワークブックを使って始めましょう。 **Samples\Graphing\US Mean Temperature.dat** のインポートを行います。
2. 列 D から列 O を選択します。
3. メニューから **統計: 多変量解析: 階層的クラスタ分析** と選択します。
4. **変数の隣にある三角形のボタン**  をクリックし、コンテキストメニュー内にある **列の選択** を選びます。



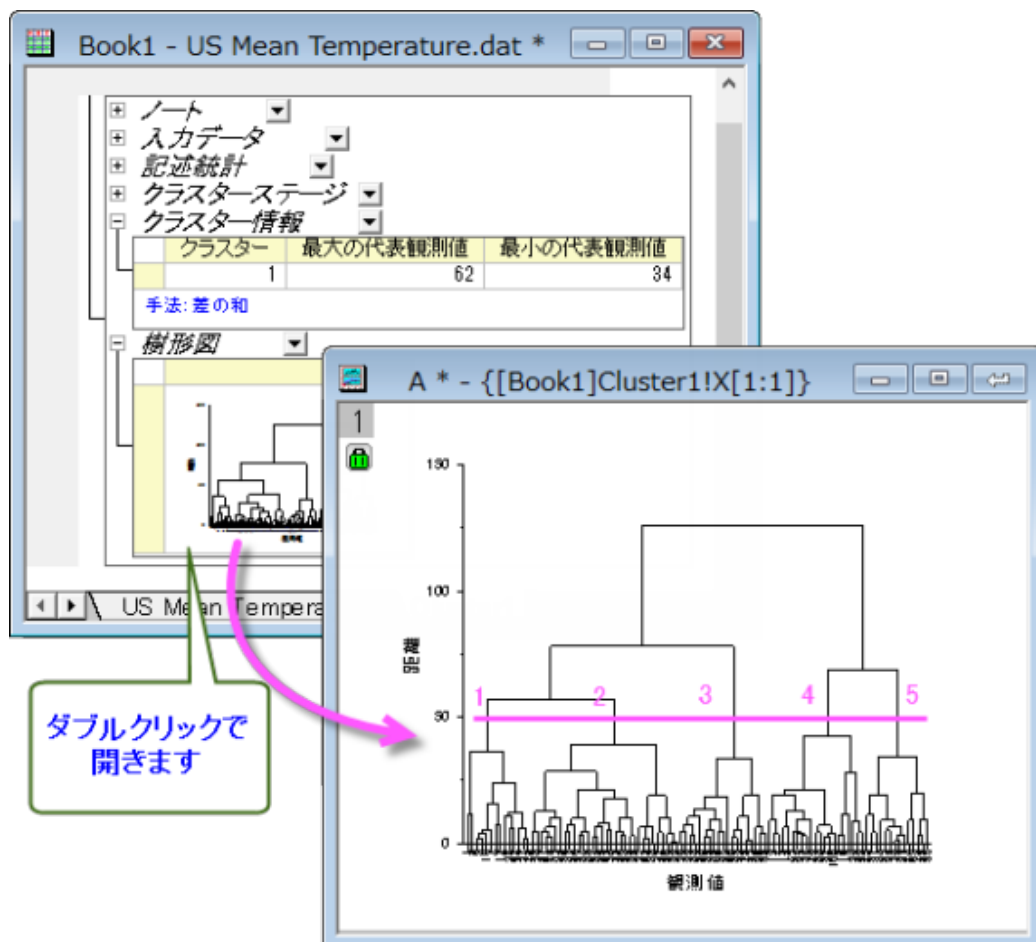
5. 列ブラウザダイアログの下部パネルで ... ボタンをクリックします。データ範囲を 1 から 100 にします。OK をクリックします。



6. ダイアログ内でクラスターが観測値に設定され、クラスターの数に1になっていることを確認します。クラスター法で Furthest Neighbour (最長距離) を選び、OK をクリックします。

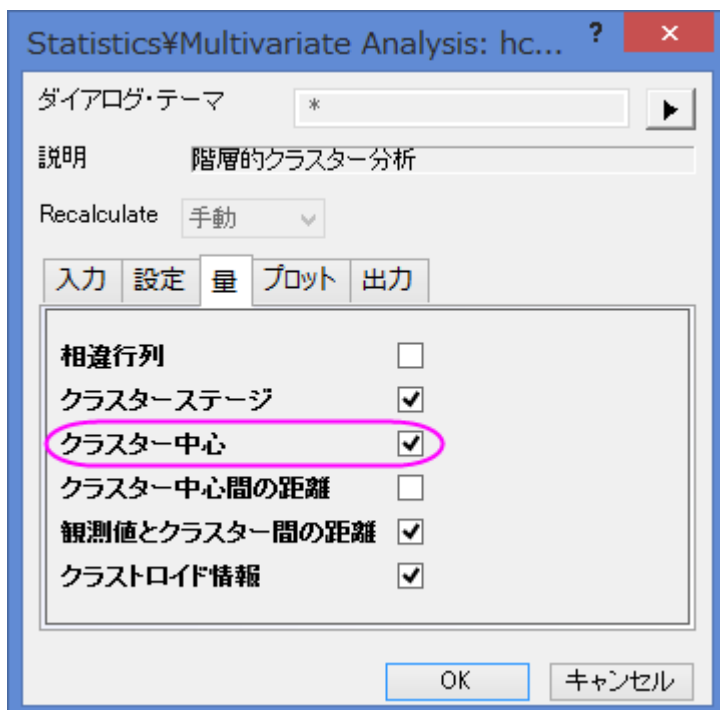
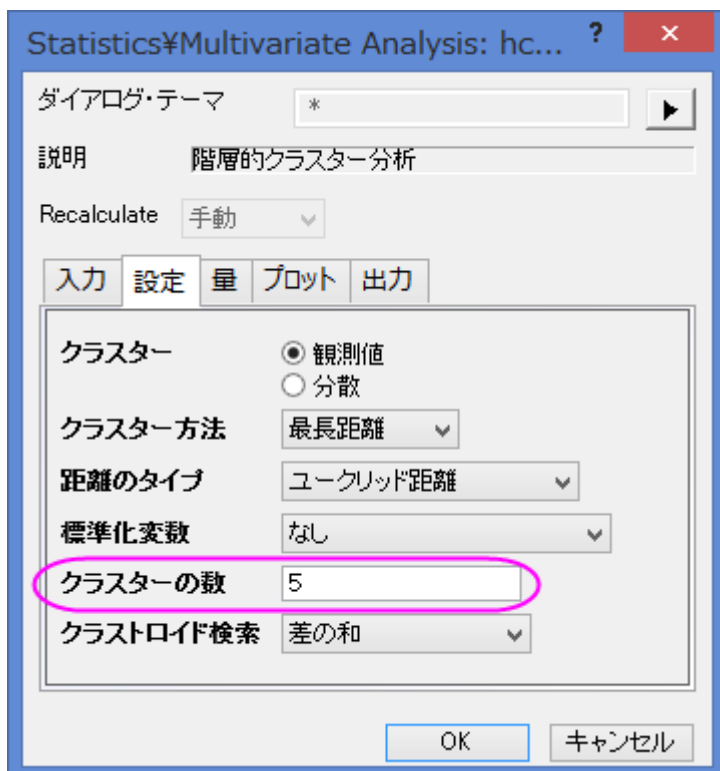


7. **Cluster 1** のシートに移動します。結果の樹形図から全体を5つのクラスターに分けることにします。

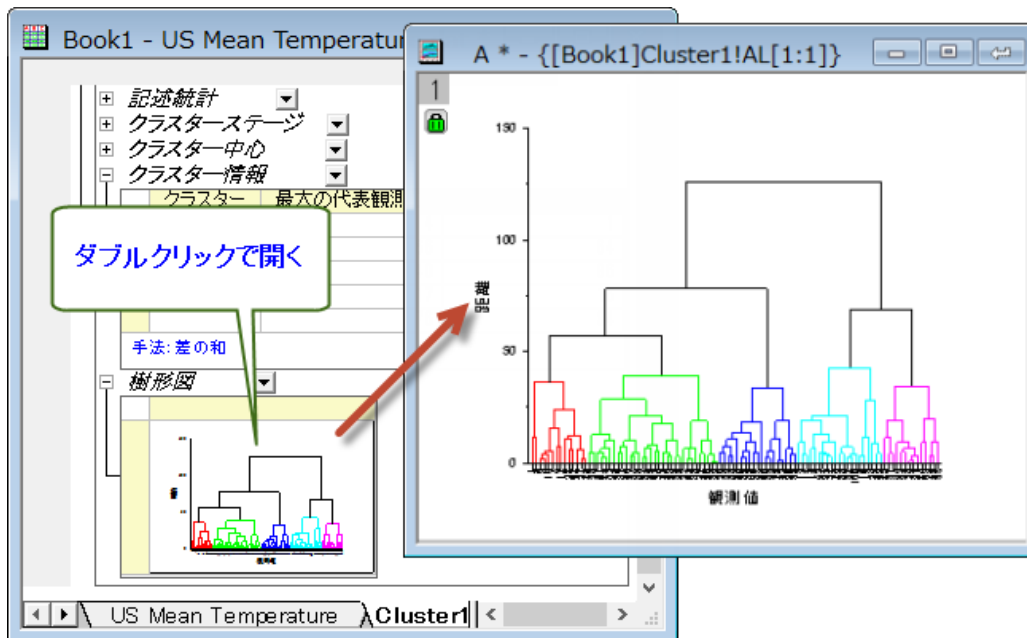



8. 樹形図についているカギのアイコンをクリックし、**パラメータの変更**をコンテキストメニューから選びます。

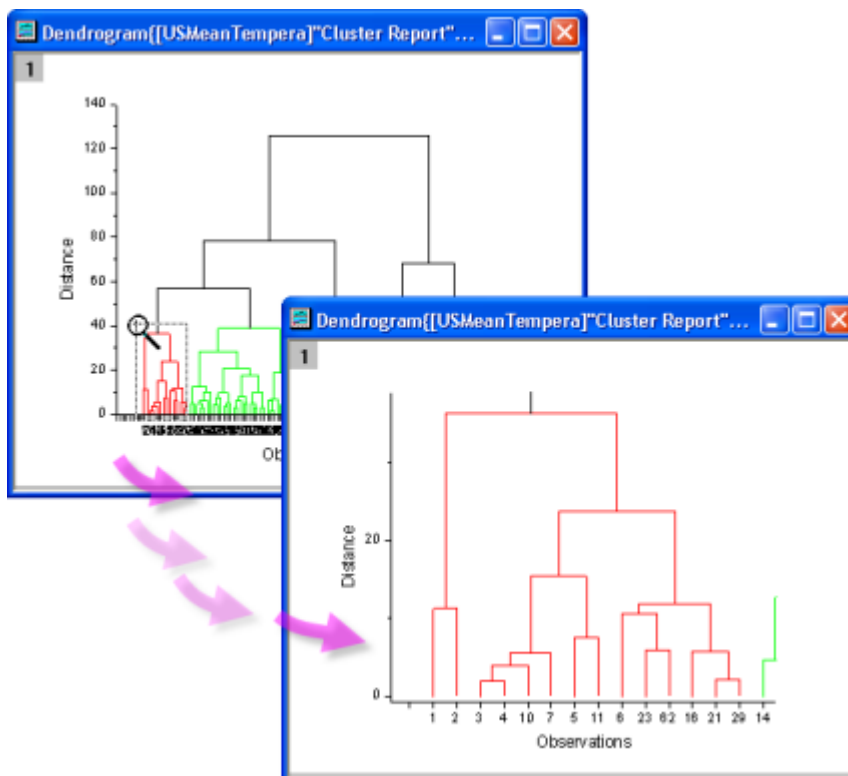
9. クラスターの数を5にし、量プランチ内にあるクラスター中心のチェックを付けます。OK をクリックします。



10. 結果の樹形図ではどのように観測値がクラスター分けされているかよくわかります。(樹形図はダブルクリックすることでグラフウィンドウに出てくるのでカスタマイズすることができます。)

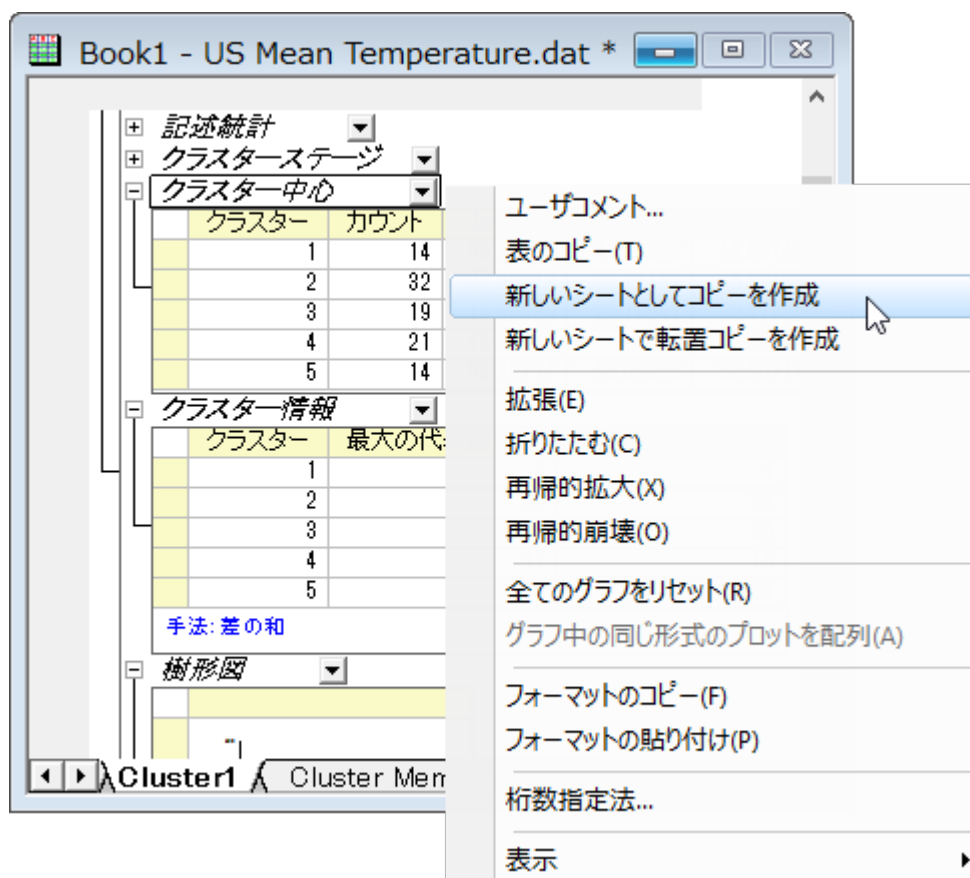





11. 観測値が多いので、この樹形図では目盛ラベルが重なっています。軸の拡大  ツールを使用して選択範囲を拡大します。

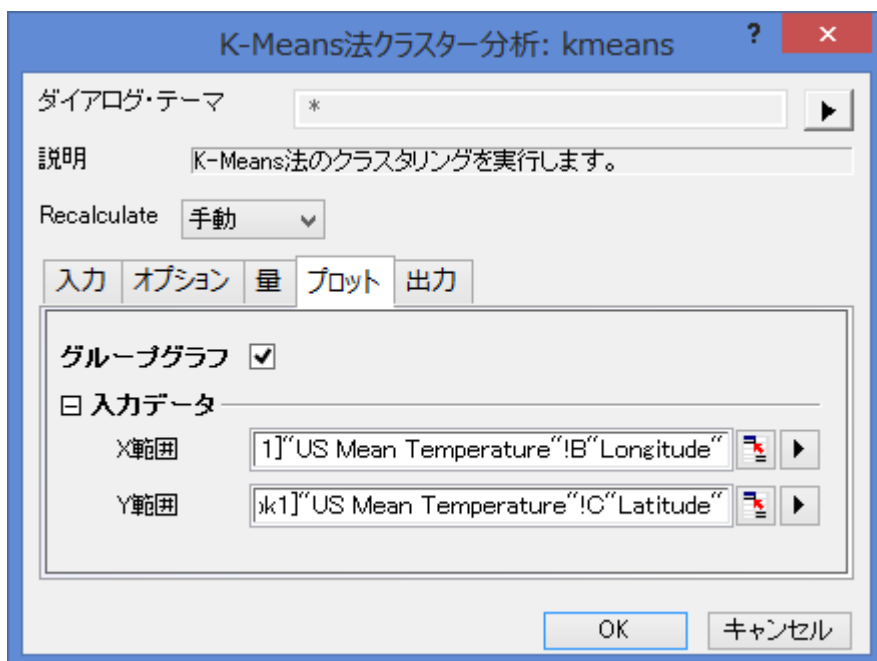


元のデータを K-means 法クラスターで分析する

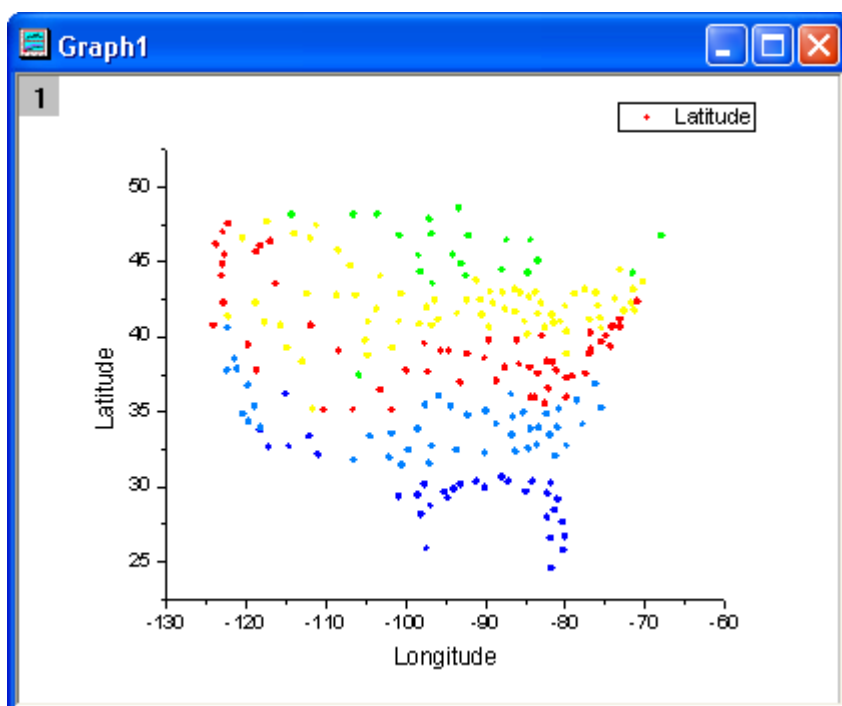
1. クラスター中心を右クリックし、新しいシートとしてコピーを作成をコンテキストメニューから選びます。新しく作成された sheet2 を初期のクラスター中心として K-means 法クラスター分析を行います。



2. 元のデータ(US Mean Temperature)があるワークシートに戻り、列 D から列 O を選択します。メニューから**統計:多変量解析:K-means 法クラスター分析**を選びます。
3. **初期のクラスター中心を指定する**にチェックを付けます。**初期のクラスター中心**の隣にある、ワークシートから選択する  のボタンを押します。するとダイアログが縮小します。
4. **Sheet2** に行き、列 D から列 O を選択します。小さくなったダイアログにあるボタンをクリックし、ダイアログを元に戻します。
5. **プロットタブ**内で**グループグラフ**を選択します。**入力データブランチ内の X 範囲**の隣にある、ワークシートから選択する  のボタンを押します。するとダイアログが縮小します。元のワークシート **US Mean Temperature** に戻り、列 **(B):Longitude** を選択します。小さくなったダイアログにあるボタンをクリックし、元に戻します。
6. **Y 範囲**の隣にある**三角形ボタン**  を選び、列 **C(Y):Latitude** を選びます。**OK** をクリックします。



7. **K-Means Plot Data1** のワークシートをアクティブにします。データは各都市の緯度に対応した5つのクラスターにまとめられたことが分かります。



5.6.3. 判別分析

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 判別分析を実行する](#)
- [3 結果の解釈](#)
 - [3.1 正準判別分析](#)
 - [3.2 分類](#)
- [4 交差確認](#)
 - [4.1 データ分析の準備をする](#)
 - [4.2 判別分析を実行する](#)
 - [4.3 交差確認](#)
 - [4.4 サブセット検証](#)
- [5 事前確率の修正](#)


サマリー

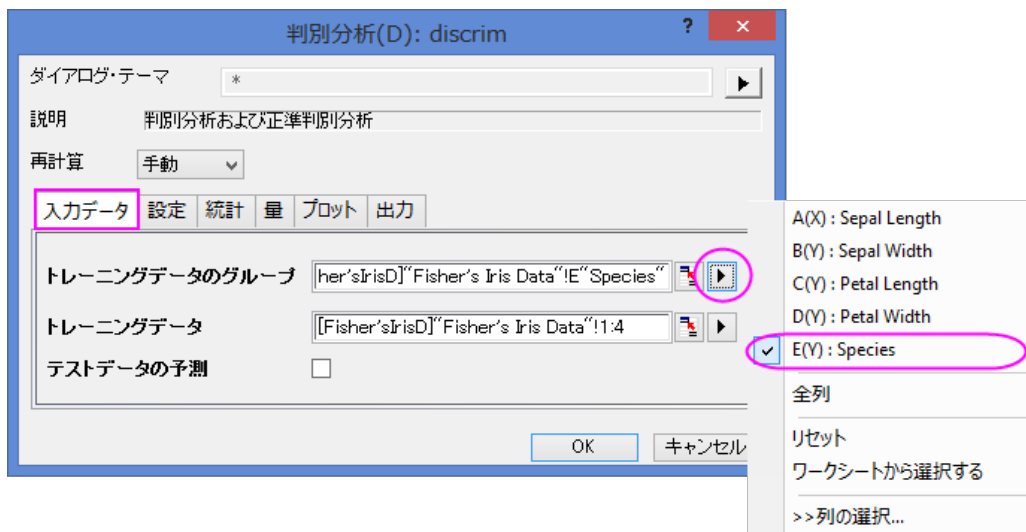
アヤメのデータまたは「フィッシャーのアヤメ」データセットは多変量データで、サー・ロナルド・エイルマー・フィッシャーによって1936年に紹介されました。このデータセットは多くの分類システムでその仕組みを分かりやすく説明するためによく使われています。このデータセットは3種のアヤメ (*Iris setosa*, *Iris virginica*, *Iris versicolor*) からそれぞれ50サンプルずつ集めたものです。各サンプルは、花弁とがくの長さの計4つの特徴を計測され、センチメートルで記録されています。判別分析を使ってこの4つの特徴をもとに種の判別を行いたいと思います。

ランダムに120行のアヤメのデータを選んで判別分析のモデルを作成します。そして残りの30行を使用してこのモデルの正確度を確認します。

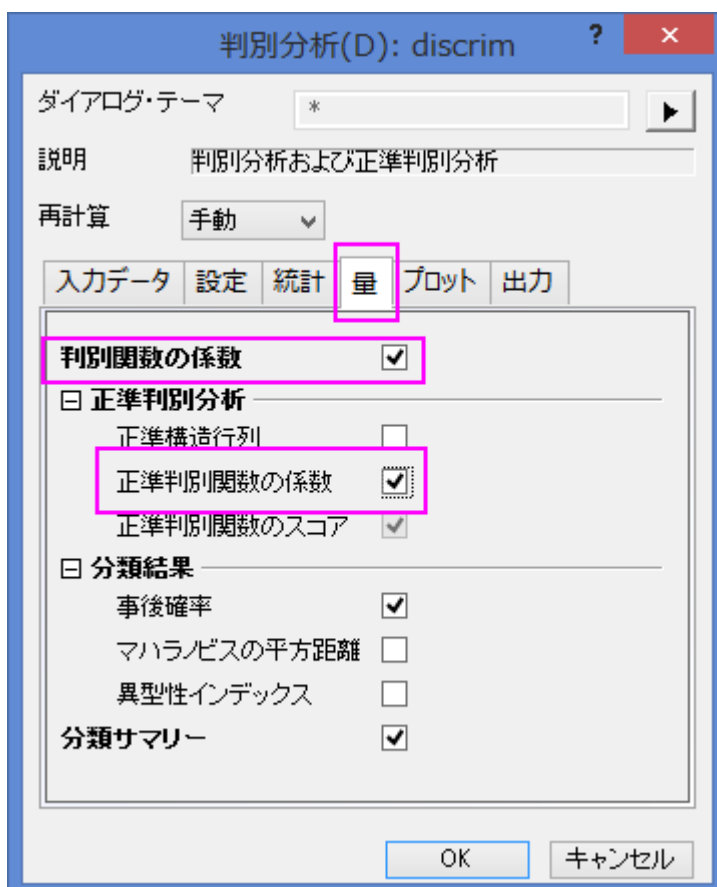
必要な Origin のバージョン: Origin 8.6 SR0 以降

判別分析

1. 新しいプロジェクトまたは新しいワークブックを開きます。\\Samples\Statistics\Fisher's Iris Data.dat ファイルをインポートします。
2. 列 A から列 D を選択し、メニューから統計: 多変量解析: 判別分析と操作して判別分析 discrim ダイアログを表示し、入力データ タブを開きます。列 A から列 D はトレーニングデータの欄に自動的に追加されます。
3. トレーニングデータのグループの隣にある三角形ボタン  をクリックしてコンテキストメニューから E(Y): Species を選びます。



4. 量のブランチを開いてから判別関数の係数のチェックボックスにチェックを付けます。正準判別分析のブランチ内にある正準判別関数の係数にチェックを付けます。他の設定はデフォルトのままにして、OK をクリックします。



結果の解釈

Discriminant Analysis Report のタブをクリックします。

正準判別分析

正準判別分析のブランチは、判別分析のためのモデルの関数を作成します。

1. 標準化されていない正準係数の表から正準判別関数を作成することができます。

	正準変数 1	正準変数 2
定数	-2.10511	-6.66147
Sepal Length	-0.82938	0.0241
Sepal Width	-1.53447	2.16452
Petal Length	2.20121	-0.93192
Petal Width	2.81046	2.83919

$$D1 = -2.10511 - 0.82938 * SL - 1.53447 * SW + 2.20121 * PL + 2.81046 * PW$$

$$D2 = -6.66147 + 0.0241 * SL + 2.16452 * SW - 0.93192 * PL + 2.83919 * PW$$

where SL = Sepal Length, SW = Sepal Width, PL = Petal Length, PW = Petal Width

2. 固有値の表から、上記の正準判別関数の重要性が分かります。1 番目の関数は 99.12%の分散を説明でき、残りの 0.88%は 2 番目の関数で説明できます。

	固有値	寄与率	累積寄与率	正準相関
1	32.19193	99.12%	99.12%	0.98482
2	0.28539	0.88%	100.00%	0.4712

3. Wilks's Lambda 検定の表では判別関数が有意にグループメンバーシップの説明をしていることを確認できます。表の中で列 **Sig.**を確認すると、どちらも 0.05 より小さくなっています。よって、どちらの値も判別分析に追加されるべきである、と分かります。

	Wilksのラムダ	カイ2乗	df	Sig.
1 to 2	0.02344	546.1153	8	8.87078E-113
2 to 2	0.77797	36.52966	3	5.78605E-8

有意水準0.05では、その次元は有意な？です。

分類

1. 観測データを分類するに当たり、観測データのスコアは線形判別関数の係数から計算され、そのスコアが評価されます。トレーニングデータの分類概要によると、**setosa** のグループ分類は 100%の正答率となっています。**versicolor** では、2 つの観測値が誤って **virginica** として分類され、**virginica** ではたった 1 つが別の分類になっていました。エラー率はたったの 2.00%です。このモデルはよく出来ているといえるでしょう。

	setosa	virginica	versicolor	Total
カウント	6	12	12	30
パーセント	20.00%	40.00%	40.00%	100.00%

2. どの観測値が誤って分類されているかを確認するために、**Training Result1** のシートに移ることが出来ます。シートでは判別モデルから計算された、元の確率とどのグループが観測に割り当てられているかを確認出来ます。

	A(Y)	B(Y)	C(Y)	D(Y)
Long Name	Allocated to Group	Post Probabilities		
Units				
Comments	Classification			
F(x)=				
UserParam1	setosa	versicolor	virginica	
79	versicolor	3.77353E-23	0.99252	0.00748
80	versicolor	9.55534E-12	1	1.91062E-8
81	versicolor	1.02211E-17	1	3.00775E-6
82	versicolor	9.64807E-16	1	3.2667E-7
83	versicolor	1.6164E-16	1	3.77844E-6
84	virginica*	4.24195E-32	0.14339	0.85661
85	versicolor	1.72451E-24	0.96356	0.03644
86	versicolor	1.34475E-20	0.99404	0.00596
87	versicolor	3.30487E-21	0.99822	0.00178
88	versicolor	2.03457E-23	0.99946	5.4431E-4
89	versicolor	5.80699E-18	0.99995	5.1371E-5
90	versicolor	5.98119E-21	0.99982	1.81687E-4
91	versicolor	5.87861E-23	0.99939	6.1442E-4
92	versicolor	5.39901E-22	0.99809	0.00191
93	versicolor	3.55951E-18	0.99999	1.12857E-5
94	versicolor	2.10415E-14	1	1.13502E-7

- 84 番目の観測値をでは、元の確立(Virginica)0.85661 が最大値であることが分かります。また、84 番目の観測値が **virginica** (85.7 %の確率で) のグループに割り当てられていることが分かります。
- しかし、ソースデータでは、84 番目の観測値は **versicolor** に属しています。ゆえに、そのモデルによるこの観測は誤って分類されています。

モデルの検証

モデル検証は、判別分析分類子の安定性を保証するために使用できます。

モデル検証を行うには 2 つの方法があります。

- 交差確認

クロス検証では各トレーニングデータはテストデータとして扱われ、トレーニングデータから外されてどのグループに属するか算出され、その分類が正しいか否かを確認します。

- サブセット検証

観測データのセットをさらに小さく分け、初めの 1 つを判別モデルの判断に使い(トレーニングセット)、もう 1 つのセットをその結果の信頼性の確認のために使います(テストセット)。

データを分析にかける準備をする

データをランダムに並べ直し、始めの 120 行をトレーニングデータとします。そして、最後の 30 行をテストデータとします。

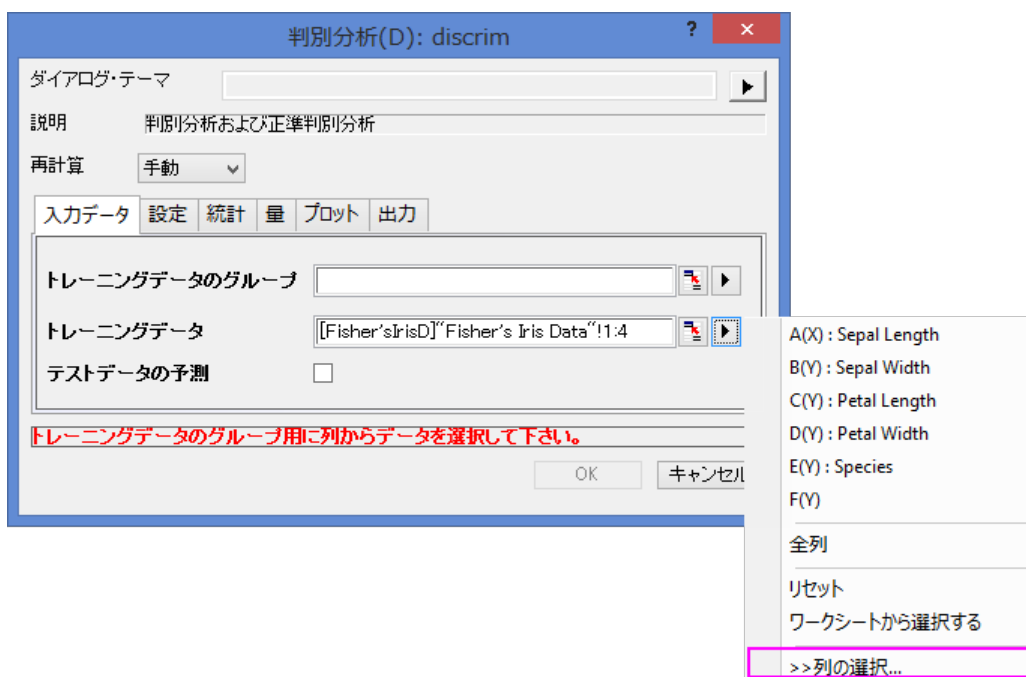
1. Fisher's Iris Data のワークシートに戻ります。
2. 新しい列を追加し、この列に**正規乱数**を入力します(列ヘッダを右クリックし、列値の一律設定:正規乱数を選択)。
3. 新しく追加した列を選択してください。右クリックして、ショートカットメニューから**ソート(ワークシート):昇順**を選択します。

Notes: Origin は正規乱数として毎回ランダムに数値を入力するので、毎回結果が変わります。

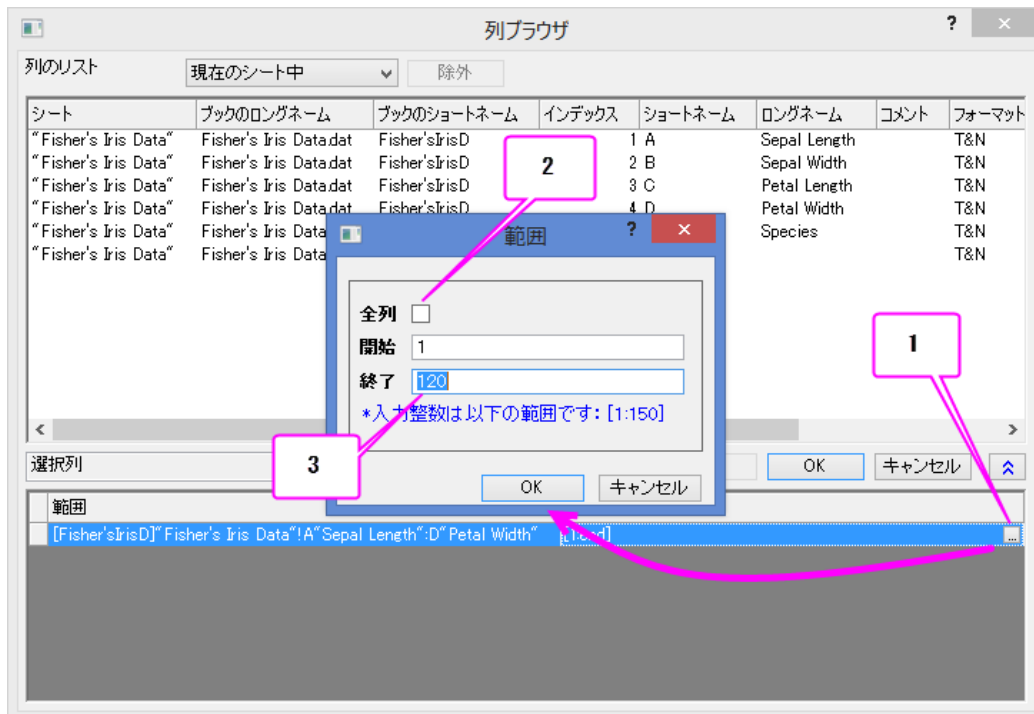
このチュートリアルと同じ結果を得るには、**Samples** フォルダ内にある Tutorial Data.opj を開き、**プロジェクトエクスプローラ**で **Discriminant Analysis (Pro Only)**サブフォルダを開きます。その中にある **Fisher's Iris Data** ワークシートの列 F のデータを使用します。





判別分析を実行する

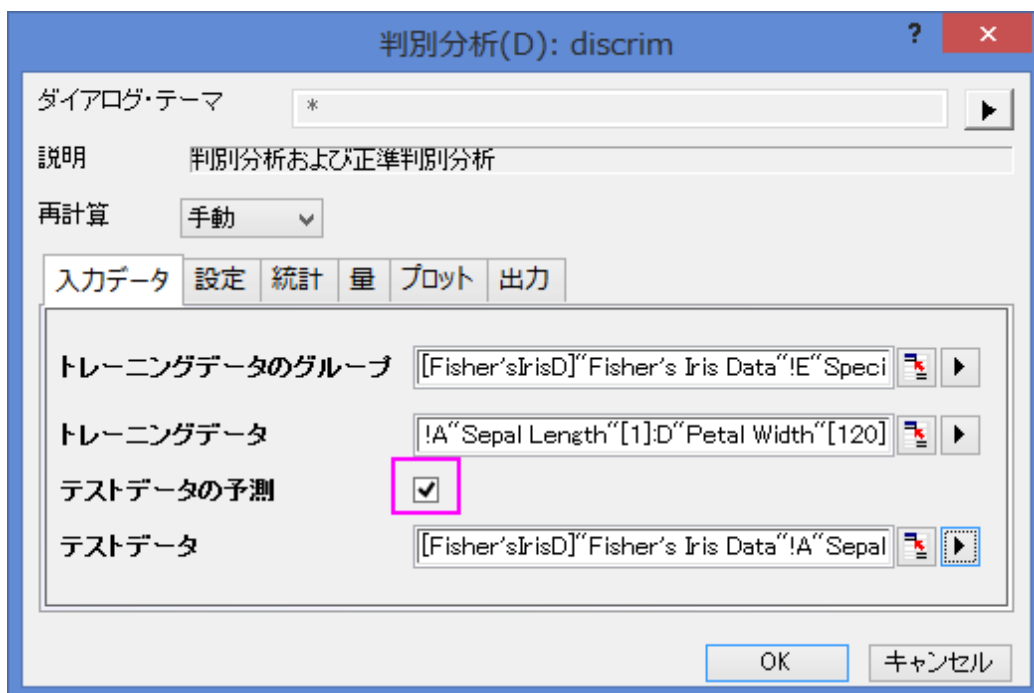
1. 列 A から列 D を選択します。
2. メニューから**統計: 多変量解析: 判別分析**を選んで **discrim** ダイアログを開きます。
3. 列 A から列 D までの始めの 120 行のデータを**トレーニングデータのグループ**として設定するには**トレーニングデータ**の隣にある**三角形ボタン**を押してコンテキストメニューで**列の選択**を選びます。



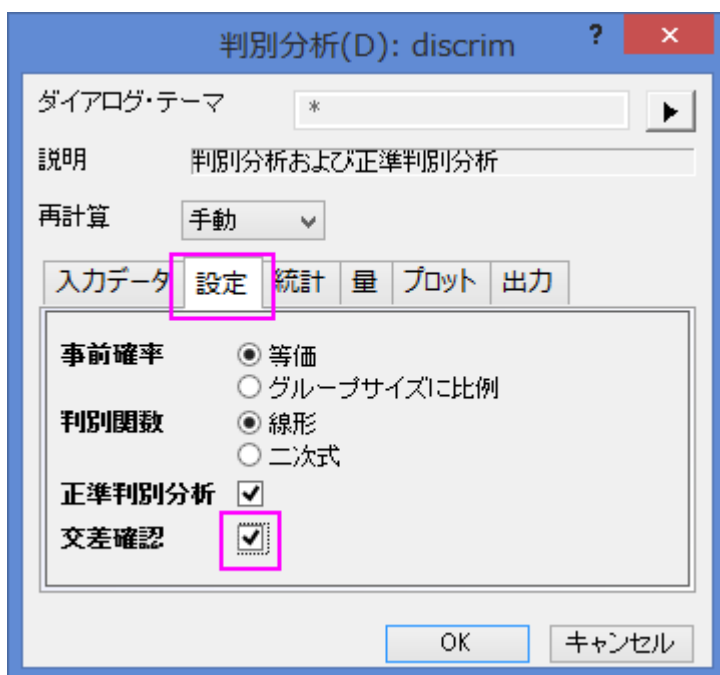
4. 列ブラウザダイアログでは下のパネルにある ... ボタンをクリックします。データ範囲を 1 から 120 にします。OK をクリックします。



5. 列 E の始めの 120 行をトレーニングデータのグループに設定するにはトレーニングデータのグループの隣にある三角形ボタン  を押して、コンテキストメニューから E(Y): Species を選びます。もう一度トレーニングデータのグループの三角形ボタン  をクリックし、列の選択をコンテキストメニューから選び、列ブラウザで範囲を 1 から 120 に設定します。OK をクリックします。
6. テストデータの予測チェックボックスのチェックを付けます。テストデータのインタラクティブボタン  をクリックします。するとダイアログが縮小します。ワークシート内で列 A から列 D を選択します。小さくなったダイアログにあるボタンをクリックし、ダイアログを元に戻します。列ブラウザを開くために三角形ボタン  をクリックしてからコンテキストメニューで列の選択を選びます。下のパネル内で ... ボタンをクリックし、範囲を 121 から 150 に設定します。



7. ラベルタブを開き、有効にするにチェックを付けます。OK をクリックします。



Cross-validation

Discriminant Analysis Report1 ワークシートに移動します。トレーニングデータのクロス検証サマリー表は推定のエラー率を各データを分類しながらモデル計算からは外しておいたものです。この手法はサブセット検証よりも「楽観的」ではあります。

トレーニングデータの分類概要

分類総数

	Predicted Group			
	setosa	virginica	versicolor	Total
setosa	44	0	0	44
	100.00%	0.00%	0.00%	100.00%
virginica	0	36	2	38
	0.00%	94.74%	5.26%	100.00%
versicolor	0	2	36	38
	0.00%	5.26%	94.74%	100.00%
Total	44	38	38	120
	36.67%	31.67%	31.67%	100.00%

エラー率

	setosa	virginica	versicolor	Total
Prior	0.33333	0.33333	0.33333	
Rate	0.00%	5.26%	5.26%	3.51%

トレーニングデータのクラスタ分析のエラー率は3.51%です。

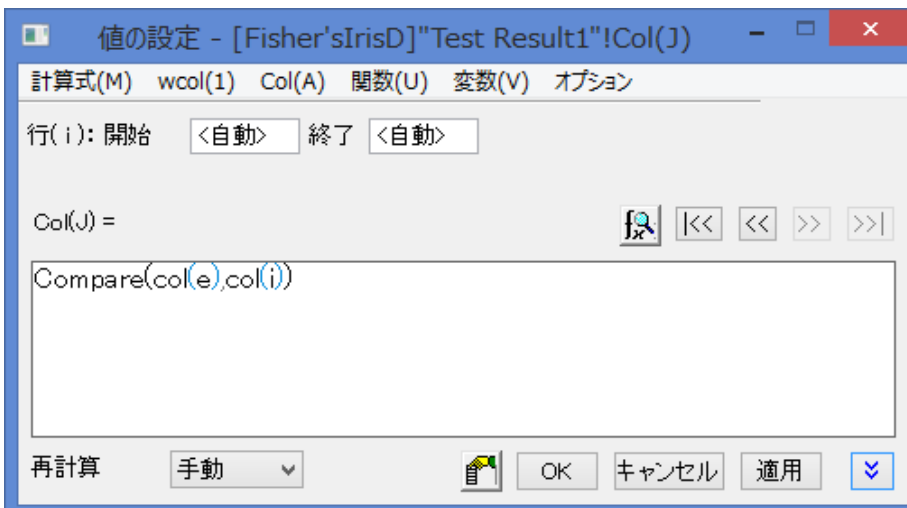
サブセット検証

1. テストデータの分類サマリー表はテストデータの分類情報を示しています。

Classification Summary for Test Data

	setosa	virginica	versicolor	Total
Count	6	12	12	30
Percent	20.00%	40.00%	40.00%	100.00%

2. Fisher's Iris Data のワークシートで、列 E/Species の最後の 30 行(121 から 150)をコピーします。
3. TestResult のワークシートに、1 列(列 E)を追加します。コピーした値を新しい列に貼り付けます。
4. ワークシートに新しい列(列 F)を追加し、右クリックして列値の設定をコンテキストメニューから選びます。開いたダイアログで **Compare(col(A),col(E))**と入力します。そしてOKをクリックします。



5. 30 個の値のうち、0 になったものはありません。これはテストデータのエラー率が 0 である事を示しています。この判別モデルの性能は良いようです。

事前確率の修正

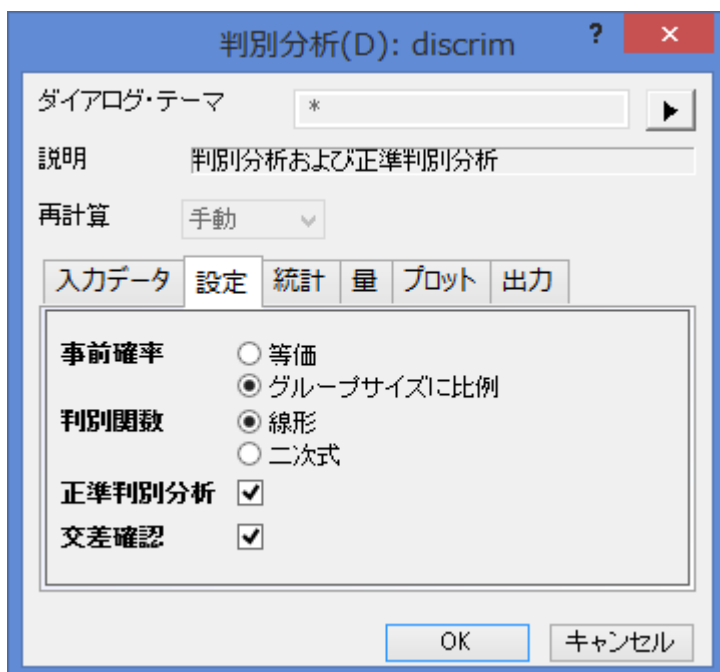
判別分析はグループメンバーシップの事前確率は同一であると仮定しています。もしグループ集団数が等しくない場合、事前確率は変わってくるかもしれません。この場合、事前確率オプションでグループサイズに比例を選択します。

1. シート **Discrim2** を開き、**トレーニングデータの分類サマリーブランチのエラー率**の表にある**事前行**を開きます。これは、このグループに属する事前確率を示しています。この事例は 3 つのグループ全てに当てはまる確率が等しくあるという前提で行われます。事前確率をグループの大きさに合わせて調節すると、全体の分類確率も良くなります。

	setosa	virginica	versicolor	Total
Prior	0.33333	0.33333	0.33333	
Rate	0.00%	2.63%	5.26%	2.63%

トレーニングデータの交差検定のエラー率は 2.63%です。

2. ボタンをクリックし、コンテキストメニューから**パラメータの変更**を選択します。事前確率のラジオボックスでは**グループサイズに比例**を選びます。OK ボタンをクリックします。



3. 分類エラー率は 2.50% である事が分かり、事前確率のエラー率が等しい場合の 2.63% よりも良い値です。

事前確率=グループに比例

エラー率 ▼

	setosa	virginica	versicolor	Total
Prior	0.36667	0.31667	0.31667	
Rate	0.00%	2.63%	5.26%	2.50%

トレーニングデータの交差検定のエラー率は2.63%です。

事前確率=等しい

エラー率 ▼

	setosa	virginica	versicolor	Total
Prior	0.33333	0.33333	0.33333	
Rate	0.00%	2.63%	5.26%	2.63%

トレーニングデータの交差検定のエラー率は2.63%です。



5.6.4. 部分最小二乗 (Partial Least Squares)

目次

- [1 サマリー](#)
- [2 PLS 回帰](#)
- [3 モデルの開発](#)
- [4 結果の解釈](#)
- [5 モデルを使用して予測する](#)

サマリー

非常に共線状な要因が多くあるとき、部分最小二乗法 (Partial least squares, PLS) は、予測モデルを構築するための方法です。


このチュートリアルでは、サンプル中に存在する 3 つの化合物の量を決定するために、サンプルのスペクトルのデータを使用します。データには、

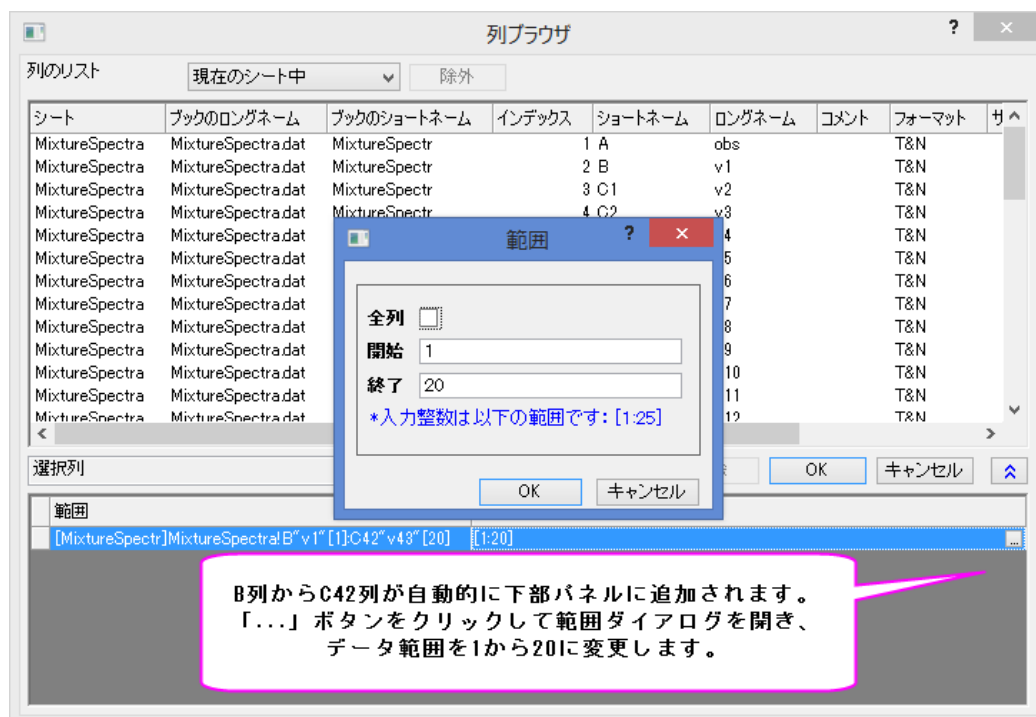
- 異なる波長での発光スペクトル強度のデータ (V1 - V43)
- 試料中の 3 つの化合物の量 (COMP1、COMP2、COMP3)


v1 - v43 から 3 つの化合物の量を予測するモデルを確立します。

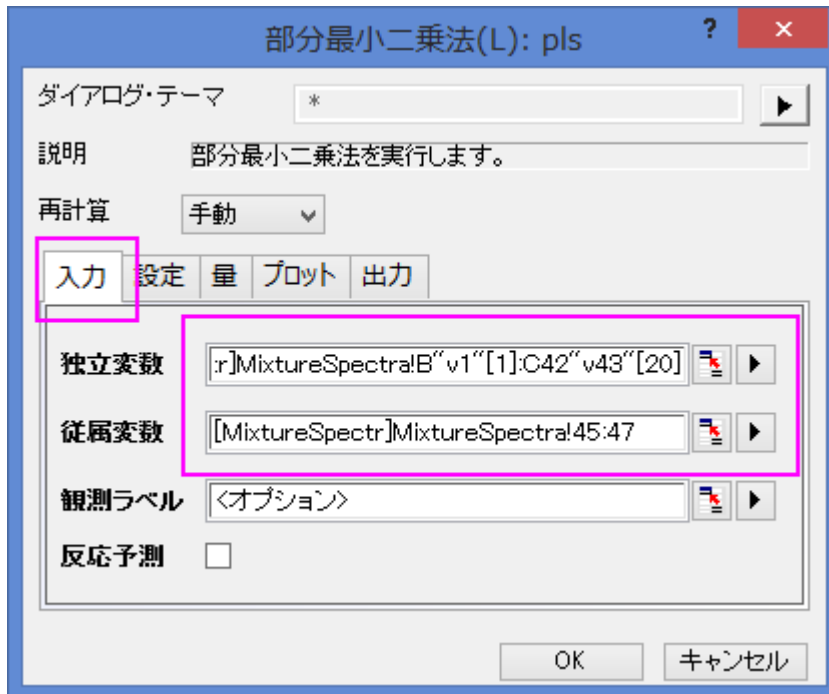
必要な Origin のバージョン: Origin 2016 SR0 以降

PLS 回帰

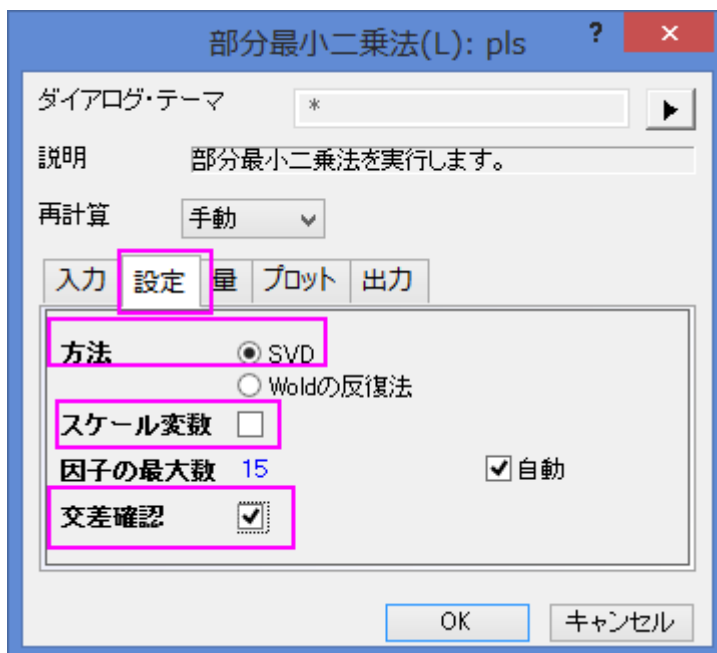
1. 新しいプロジェクトの新しいワークブックで開始します。\\Samples\Statistics\MixtureSpectra.dat ファイルをインポートします。
2. 列("v1")から("v43")までを選択します。
3. メニューから**統計:多変量解析:部分最小二乗法**と選択します。開いた pls ダイアログの入力データのタブを開きます。
4. 選択した列が自動的に独立変数として追加されます。**独立変数**の隣にある**三角形のボタン**  をクリックし、コンテキストメニュー内にある**列の選択**を選びます。
5. **列ブラウザ**ダイアログの右下にある矢印ボタンをクリックして下部パネルを表示します。
6. 下部パネルで ... ボタンをクリックします。**範囲**ダイアログが開くので、**全列**のチェックを外し、データ範囲を **1** から **20** に変更して OK をクリックします。さらに OK をクリックし、列ブラウザを閉じます。



7. 従属編集の右側にある参照ボタンをクリックします。ワークシートに戻り列("comp1")を選択して列("comp3")へドラッグします。再度ボタンをクリックしてダイアログボックスを開きます。

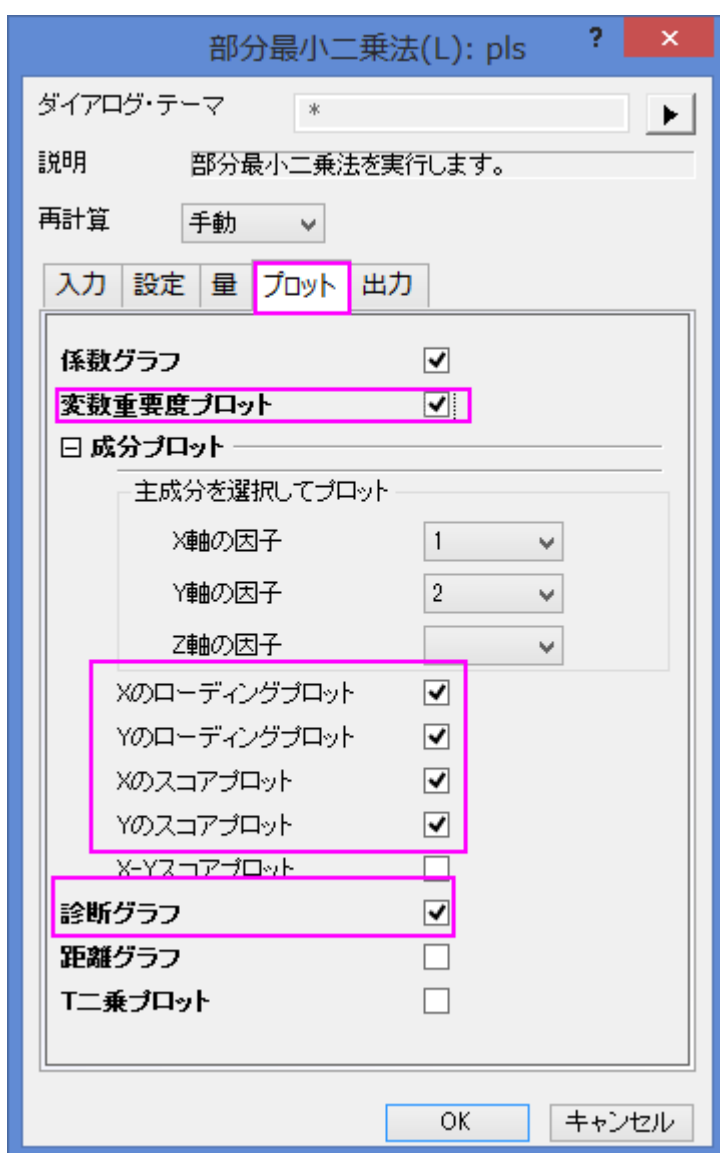


8. v1 から 143 までは吸光度なので、それら標準化する必要はありません。設定タブをクリックし、方法を SVD にして、スケール変数のチェックを外します。
9. 交差確認にチェックを付けます。これにより、モデルの要因の最適な数を見つけやすくなります。



10. プロットの項目を開き、さらに、成分プロットの項目を開きます。以下のチェックボックスにチェックを付け、OK ボタンをクリックします。

- 変数重要度プロット
- X のローディングプロット
- Y のローディングプロット
- X の得点プロット
- Y の得点プロット
- 診断グラフ



モデルの開発

ワークブックの、PLS1 シートを開きます。

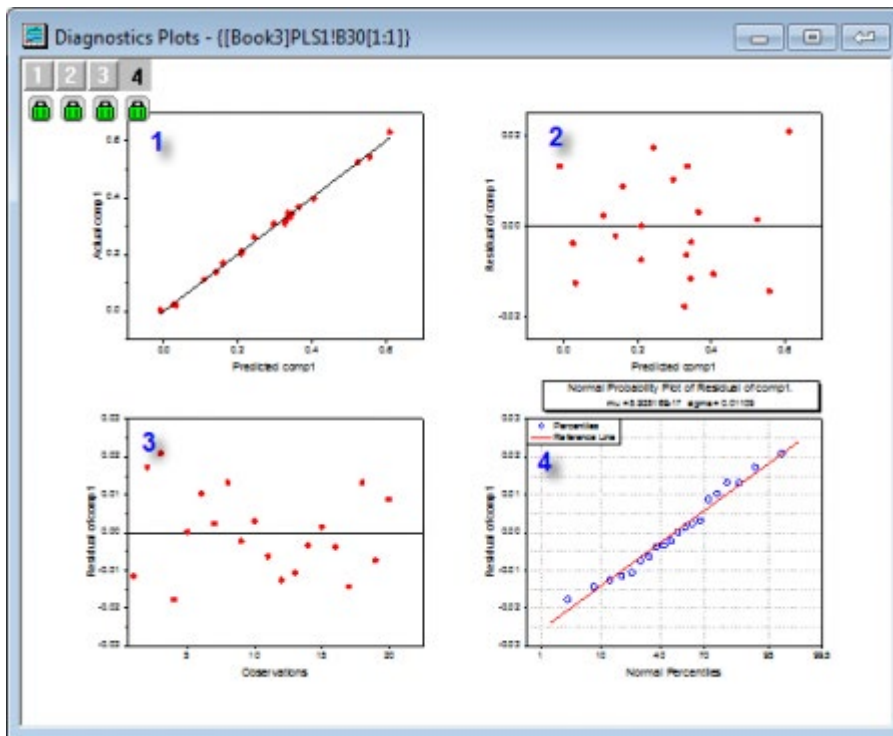
1. **交差確認**の表は、抽出のための最適な因子数を示しています。PRESS はモデルの予測した残差の二乗和です。PRESS の最小ルート平均のモデルが、最適な因子数を持ちます。

ファクタ	PRESSのルート平均
0	0.1678
1	0.08999
2	0.03165
3	0.03096
4	0.02836
5	0.02895
6	0.02995
7	0.03051
8	0.03028
9	0.03021
10	0.03151
11	0.03279
12	0.03312
13	0.03397
14	0.03428
15	0.03459

最小ルート平均のPRESS: 0.02836
最適な因子数: 4

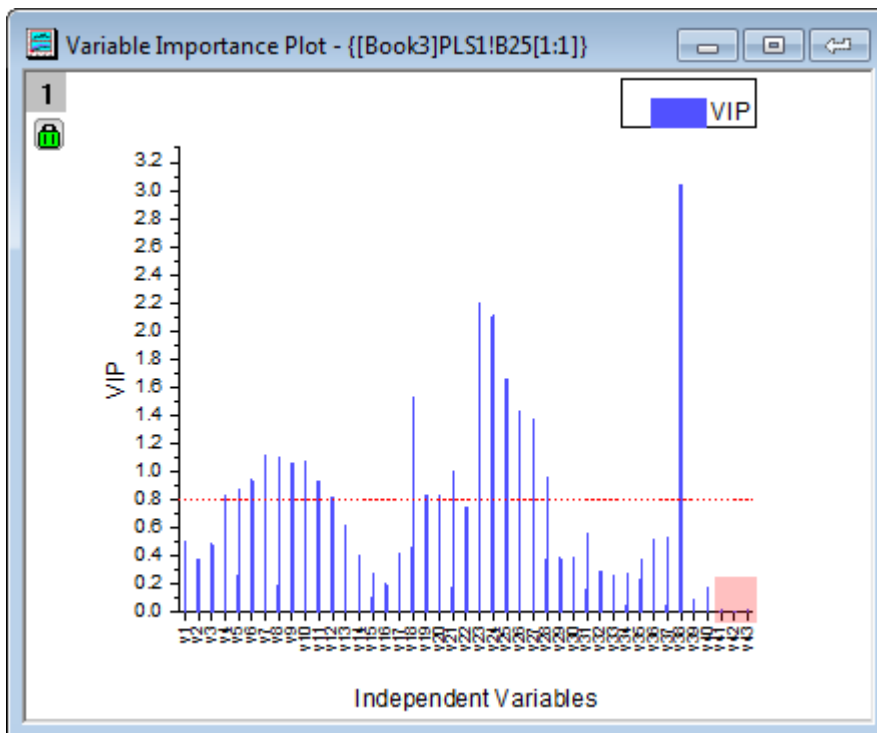
PRESSの最小ルート平均のモデルが最適な因子数を持ちます

2. 診断グラフは、YとXの残差プロットで、モデルの質を判断するのに使用されます。全体的に、フィットされたモデルが良好であると言えます。なぜなら、
 - レイヤ 1 - **予測値と実際の値**のグラフは、モデルが最初のコンポーネントとフィットしていることを示しています。
 - レイヤ 2 - **予測値と残差**グラフでは、残差はゼロの周りにランダムに分布しています。これは、プロセスにはドリフトが存在しないことを意味します。
 - レイヤ 4 - 残差の P-P 図は、分散が正規分布しているかどうか確認するために使用できます。結果はほぼ直線なので、分散は正規分布していることを意味します。

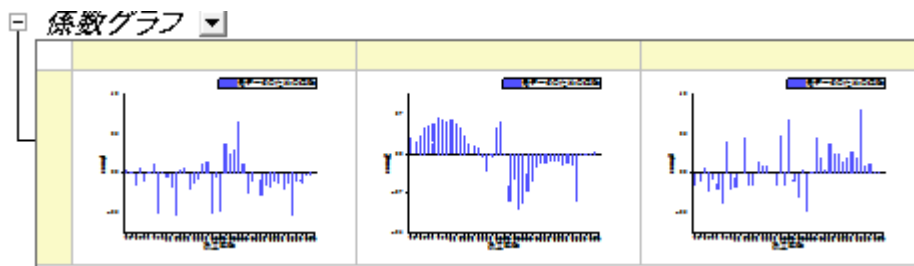


3. v1 から v43 の重要度のサマリーは VIP グラフで与えられます。変数が小さな回帰係数と低い VIP 値をもつ場合、モデルでそれを除外することを検討できます。例えば

- 以下のグラフでは、v41~v43 の VIP 値は小さい



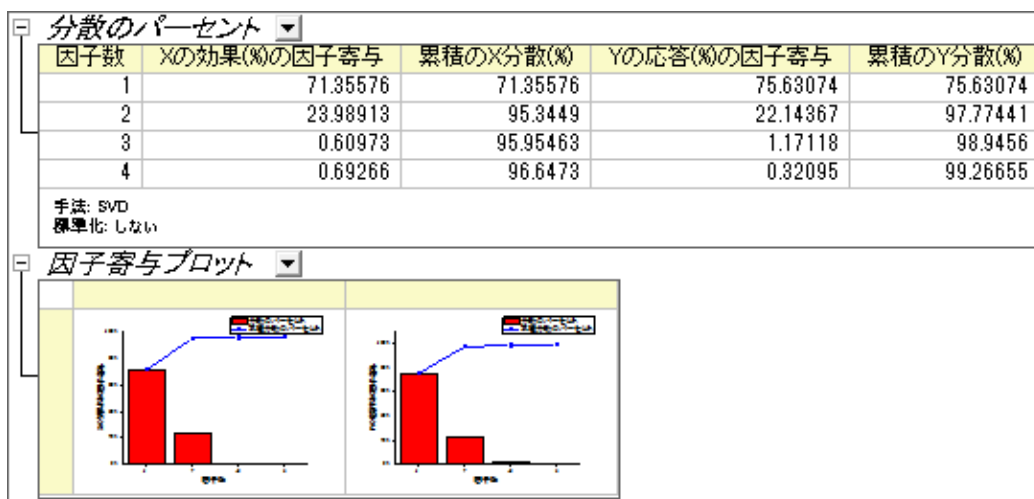
- 以下の 3 つの係数グラフでは、v41~v43 の係数は小さい



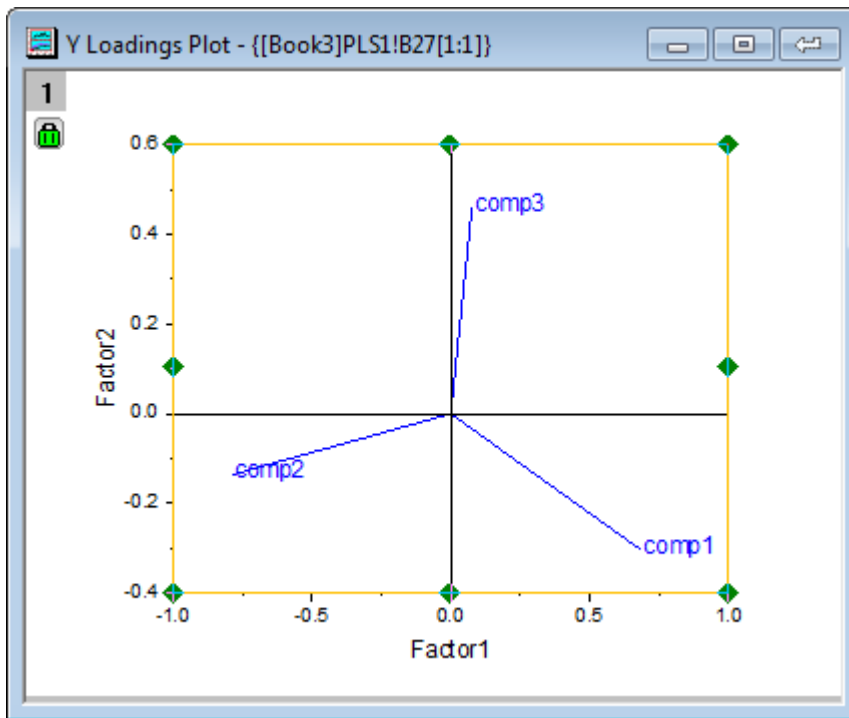
4. しかし、ステップ 2 のように、このモデルは良くフィットしているので、これらの重要度の低い変数はそのままにしても良いことがわかります。

結果の解釈

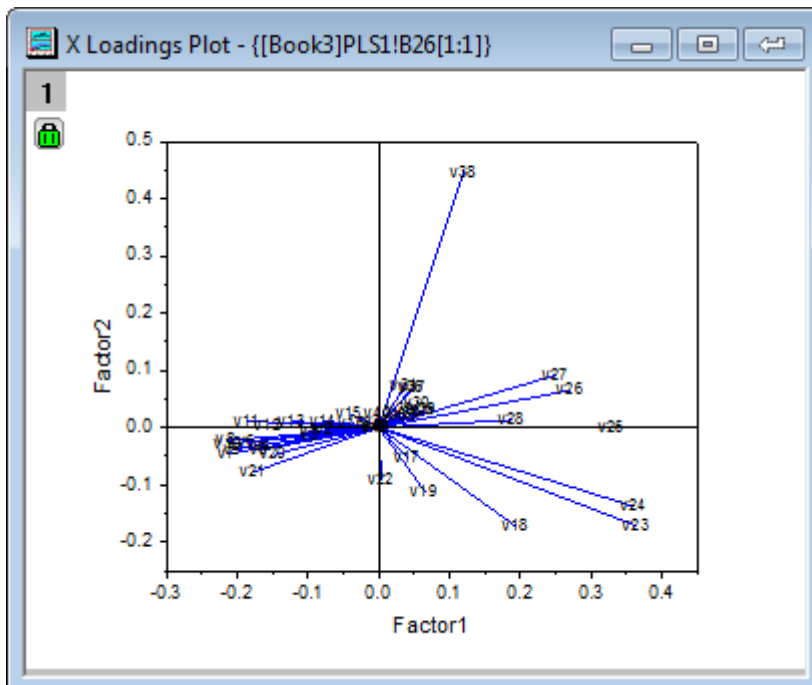
1. **Variance Explained** テーブルは、各要因によって説明される分散の割合を示します。このサンプルでは、ファクター1は X 効果の分散 71.36%と Y 効果の分散 75.6%を説明します。このサンプルでは、ファクター2は X 効果の分散 23.99%と Y 効果の分散 22.14%を説明します。**因子寄与プロット**から、これら 2 つの X 効果と Y 効果が 95%以上になることから、最初の 2 つの因子にはより多くの注意を払うべきであることがわかります。



2. ローディングプロットは、最初の 2 つの因子の空間での、変数 X と Y 間の関係を明らかにします。
- Y ローディングプロットから、3 つの化合物は、因子 1 と因子 2 上で異なる負荷を持っていることを確認できます。





- X ローディングプロットからは、v26 ~ v38 は因子 2 に似たような高い負荷をもち、v17、v18、v19、v23、v24 は因子 1 と 2 に同様軽い負荷を持つことがわかります。

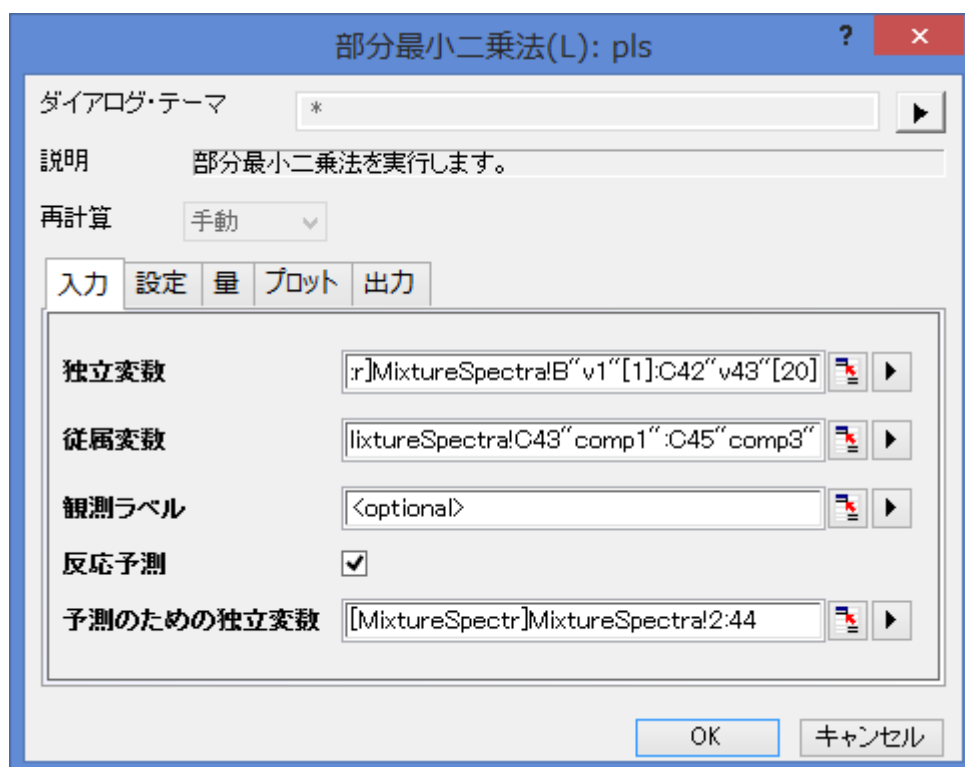


Note: 詳細にプロットの情報を確認するには、ローディングプロットを含むグラフをダブルクリックしてウィンドウとして開き、スケールインツールを使用して拡大できます。 

モデルを使用して予測する

モデルが確立されると、異なる波長でのそれらの新しい発光スペクトル強度のサンプルに対して、3つの化合物の量を予測することができます。

1. PLS1 シートにある錠前マークをクリックし、**パラメータを変更**をコンテキストメニューから選びます。
2. 開いたダイアログで、**入力データ**の項目にある、**反応予測**にチェックを付けます。
3. **予測のための独立変数**の右側にある参照ボタンをクリックします。ワークブックに戻り、**MixtureSpectra** シートを開きます。列("v1")から列("v43")までを選択します。再度ボタンをクリックしてダイアログボックスを開きます。
4. **予測のための独立変数**の隣にある、**三角形のボタン**をクリックし、コンテキストメニュー内にある**列の選択**を選びます。
5. **列ブラウザ**ダイアログの下部パネルで ... ボタンをクリックします。**全列**のチェックを外し、データ範囲を **21** から **25** に変更します。**OK** をクリックして、**範囲**ダイアログと**列ブラウザ**ダイアログを閉じます。



6. **OK** ボタンをクリックして設定を適用し、ダイアログを閉じます。
7. **PLSResults1** に、新しい5つのサンプルに対する3化合物の予測量が入力されています。

	E1(X)	E2(Y1)	E3(Y2)	E4(Y3)
ロングネーム	観測値	comp1	comp2	comp3
単位				
コメント	テストデータの予測反応			
F(x)=				
1	21	0.03112	0.60104	0.35266
2	22	0.45822	0.22111	0.2981
3	23	0.23019	0.43717	0.30898
4	24	0.33108	0.23231	0.40731
5	25	0.37709	0.38007	0.21355



5.7. 検出力とサンプルサイズ

内容

- [1 サマリー](#)
- [2 学習する項目](#)
- [3 \(PSS\) 1 集団の t 検定](#)
- [4 \(PSS\) 2 集団の t 検定](#)
- [5 \(PSS\) 対応のある t 検定](#)
- [6 \(PSS\) 一元配置の分散分析](#)

サマリー

検出力とサンプルサイズの分析は実験計画をたてる際に重要になります。不十分なデータは検出力が足りなくなり、本来ならば棄却しないはずの帰無仮説を棄却する恐れがあり、データを余分に集めてしまうのは時間と資源を無駄にしてしまうことに繋がります。つまり、実験を行う前に適切なサンプルサイズを割り出すことが非常に大切になってきます。実験の検出力はある特定のサンプルサイズを元にすれば計算でき、また、特定の検出力で検定できるサンプルサイズも計算できます。

必要な Origin のバージョン:8.0 SR6

学習する項目

このチュートリアルはサンプルサイズの計算方法、または検出力を推定する方法を、実際に使用するデータを元に紹介します。

5.7.1. (PSS) 1 集団の t 検定

背景:

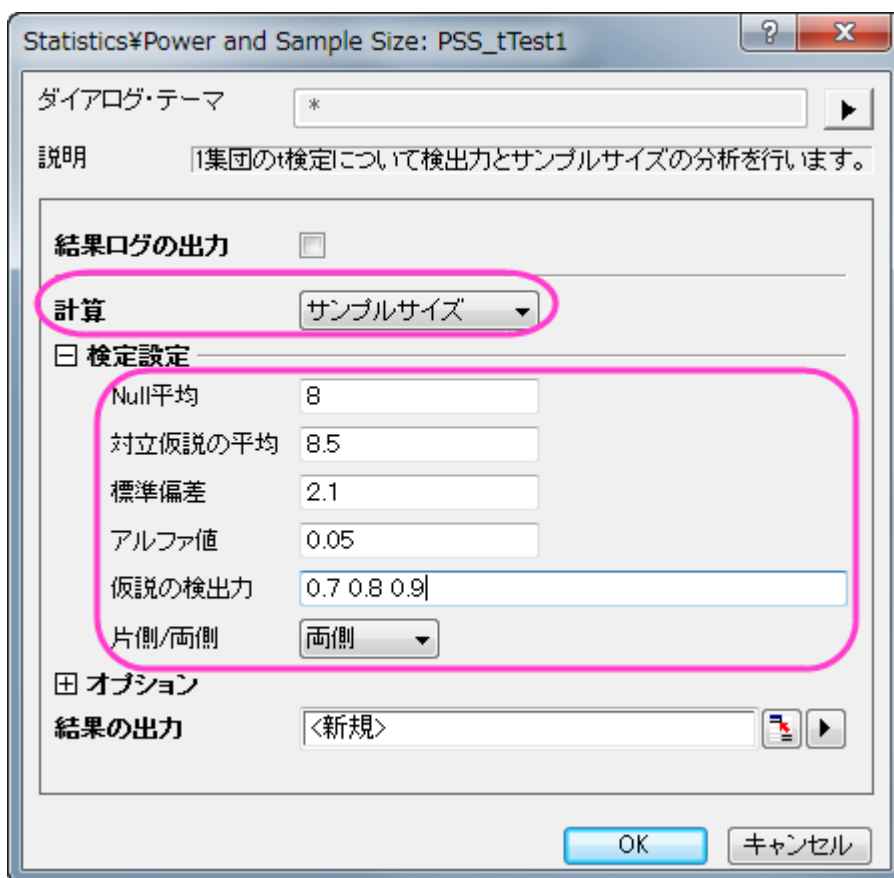
社会学者が、アメリカにおける乳児の平均死亡率が 8 であるかどうか 調べるものとして。実験計画では、死亡率の差は 0.5 より大きく変化しません。また、予備実験から、標準偏差は 2.1 になるはずである、という事が分かっています。

質問:

検出力の値が 0.7, 0.8, 0.9 に対して、信頼水準 95% ($\alpha=0.05$) で乳児の平均死亡率を推定するのに必要なサンプルサイズはいくつでしょうか？

Origin での操作:

1. 空のワークシートをアクティブにし、メニューから**統計: 検出力とサンプルサイズ: (PSS)1 集団 t 検定**と選択します。
2. **PSS_tTest1** ダイアログで以下の画像のように設定を行い、**OK** をクリックします。



Origin の出力:

結果シートが作成され、指定された仮説の検出力に必要な標本サイズを表示します。

□ 仮説検出力の標本サイズ ▼

	Alpha	検出力	サンプルサイズ
	0.05	0.7	111
	0.05	0.8	141
	0.05	0.9	188

Null 仮説 平均=8; 対立仮説 平均=8.5; 標準偏差=2.1; 両側検定

結果の解釈:

この結果によると、実験を計画する際に検出力 0.7 にするには 111、0.8 にするには 141、0.9 にするには 188 のサンプルを集める必要がある事が、計算により分かりました。

5.7.2. (PSS) 2 集団の t 検定

背景:

ある診療所では、2つの保険制度 Healthwise と Medicare に加入しています。この2つの保険に対して、請求してから補償給付までの平均時間(日数)を比較するものとします。経験上、Healthwise では、平均 32 日で標準偏差 7.5 日であることが分かっています。また、Medicare は、補償給付までの平均時間は 42 日で、標準偏差は 3.5 日です。

質問:

今、それぞれの保険に対して行われた 10 個の請求を抜き出し、補償までの平均時間を記録します。2つの保険における平均時間の差が 5%以上になるための検出力はいくつでしょうか？

Origin での操作:

1. プールド標準偏差を次のように計算します。

$$\sqrt{((5 - 1) * 7.5^2 + (5 - 1) * 3.5^2) / (5 + 5 - 2)} = 5.85235$$

*この値は後程検出力を計算する際に標準偏差として使用します。

2. 第 1 グループと第 2 グループのサンプルサイズは 10 になります(合計すると 20)。
3. 空のワークシートをアクティブにし、メニューから統計: 検出力とサンプルサイズ: (PSS) 2 集団 t 検定と選択します。
4. PSS_tTest2 ダイアログで以下の画像のように設定を行い、OK をクリックします。

Statistics¥Power and Sample Size: PSS_tTest2

ダイアログ・テーマ *

説明 独立2集団のt検定について検出力とサンプルサイズの分析を行います。

結果ログの出力

計算 検出力

検定設定

第1グループの平均 32

第2グループの平均 42

標準偏差 5.85234

アルファ値 0.05

仮説のサンプルサイズ 10

片側/両側 両側

オプション

結果の出力 <新規>

OK キャンセル

Origin の出力:

結果が出力され、検出力が計算されました。

仮説標本サイズの検出力

Alpha	サンプルサイズ	検出力
0.05	10	0.95054

グループ1 平均=32; グループ2 平均=42; 標準偏差=5.85234; 両側検定

結果の解釈:

それぞれに対して 10 個の請求を集めれば、その診療所は 0.95054:1、または 95%の可能性で差を検出できると結論付けることができます。帰無仮説を棄却できず、誤って 2 つの平均は同じである(異なっていない)と結論付ける危険性は、4.946%(1-0.95054)あります。

5.7.3. (PSS) 対応のある t 検定

背景

同種の 2 台の機械を使用し、薄いフィルムの中のアモルファスシリコンの厚みを測定しています。これら 2 台の機械の計測結果に差があるかどうか調べるため、エンジニアが 2 台の計測結果を比較する計画を立てました。

以前行われたアモルファスシリコンの実験から、差の標準偏差は $2\mu\text{m}$ であるとわかっています。さらに、これら 2 台の機械の差は $0.5\mu\text{m}$ を超えてはならず、1 番目の機械で計測した平均の厚みは $5000\mu\text{m}$ です。

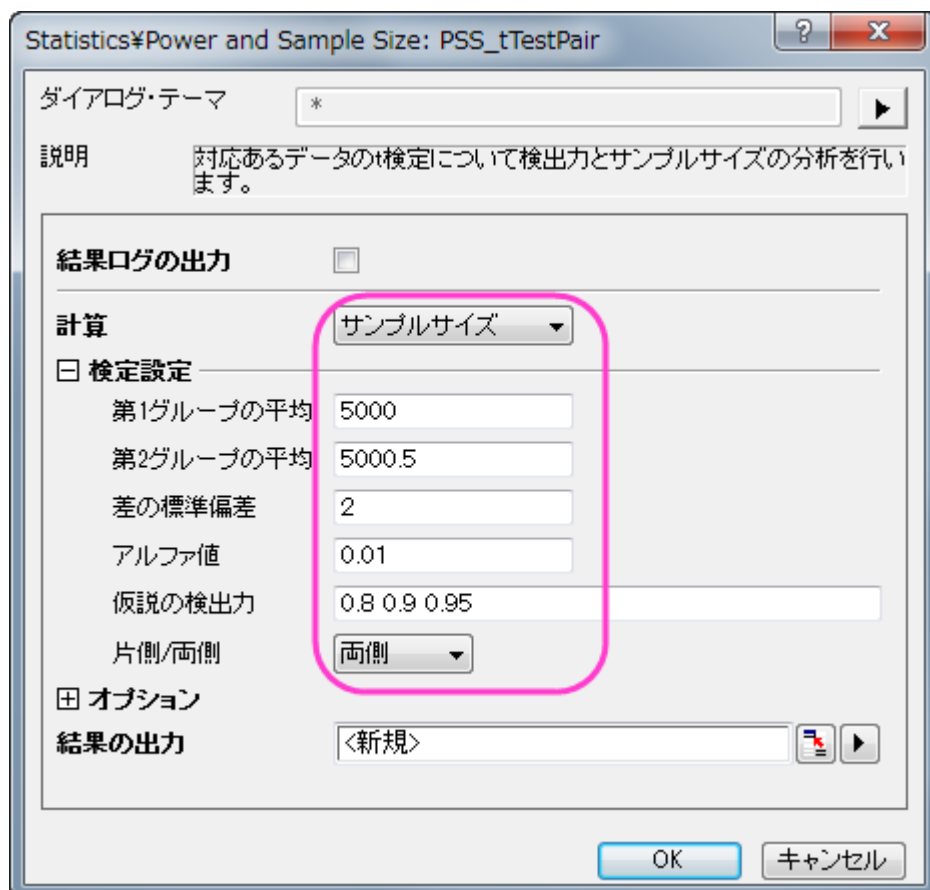
質問:

検出力の値が 0.8, 0.9, 0.95 に対して信頼水準 99%で結果が必要なとき、いくつの標本をとる必要がありますか？

Origin での操作:

上記情報から、1 番目のグループの平均は 5000 μm 、2 番目のグループは 5000.5 μm となっています。

1. 空のワークシートをアクティブにし、メニューから**統計: 検出力とサンプルサイズ: (PSS) 対データt検定**と選択します。
2. 表示される **PSS_tTestPair** ダイアログでは下図のように設定を行い、**OK** をクリックします。



Origin の出力:

結果シートが作成され、指定された仮説の検出力に必要なサンプルサイズが出力されます。

□ 仮説検出力の標本サイズ ▼

Alpha	検出力	サンプルサイズ
0.01	0.8	191
0.01	0.9	242
0.01	0.95	289

グループ1 平均=5000; グループ2 平均=5000.5; 標準偏差=2; 両側検定

結果の解釈:

191 個のサンプルを計測した場合、エンジニアは 80%の確率で差を確認できるといえます。同じように 242 個のサンプルでは 90%、289 個のサンプルを使用すれば 95%の確率で、2 台の機械の計測に差がある場合は計測できます。

5.7.4. (PSS) 一元配置の分散分析

背景:

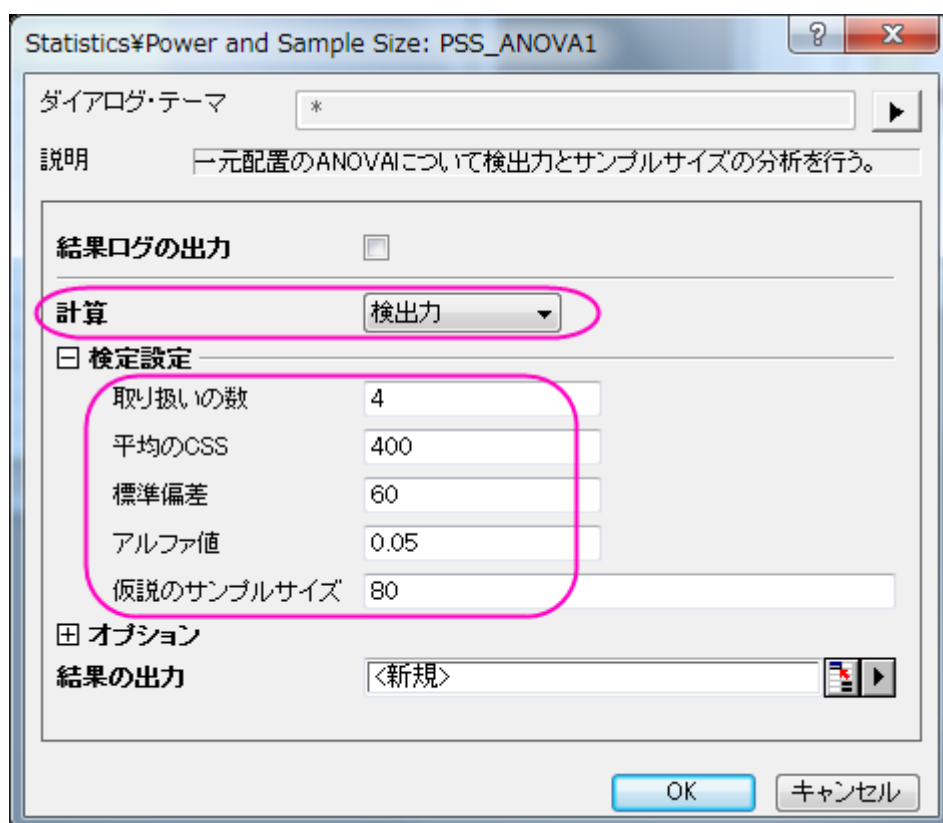
異なる植物で窒素含有量が異なるか、調べるものとします。4種類の植物に対して窒素含有量をミリグラム単位で記録する実験計画があります(各々の種類に対して80個の標本を観測します)。先に実験を行った研究者は、MSE(平均二乗誤差)の平方根は60で、平均のCSS(補正平方和)は400であると提示しています。

質問:

この計画は適切でしょうか?(つまり、計算した検出力は妥当でしょうか?)

Origin での操作:

1. 各グループのサンプルサイズは80です。
2. 空のワークシートをアクティブにし、**統計:検出力とサンプルサイズ:(PSS)一元配置 ANOVA**と選択します。
3. **PSS_ANOVA1** ダイアログで以下の画像のように設定を行い、**OK** をクリックします。



Origin の出力:

結果シートが作成され、検出力が現在の状況から算出されます。

□ 仮説標本サイズの検出力 ▼

Alpha	サンプルサイズ	検出力
0.05	80	0.6993

*処理 = 4; 平均の修正二乗和(CSS) = 400; 標準偏差(SD) = 60

結果の解釈:

どうやら、元の実験計画はあまりよくないようです。各グループから差を検出する可能性は、この計画だと69%しかありません。より説得力のある結果を得るために、研究者は植物の種ごとにさらに多くの標本を集めるべきでしょう。



5.8. ROC 曲線

サマリー

受信者動作特性(ROC)分析曲線は、主に臨床化学、薬理学、生理学の分野で診断検査の時に使用されます。診断検査の正確性や情報を比較する際に良く使用され、基準手法としても広く認知されています。

ROC 曲線を使う方法についての詳細は、このヘルプファイル を参照してください。

学習する項目


このチュートリアルでは、以下の項目について説明します。

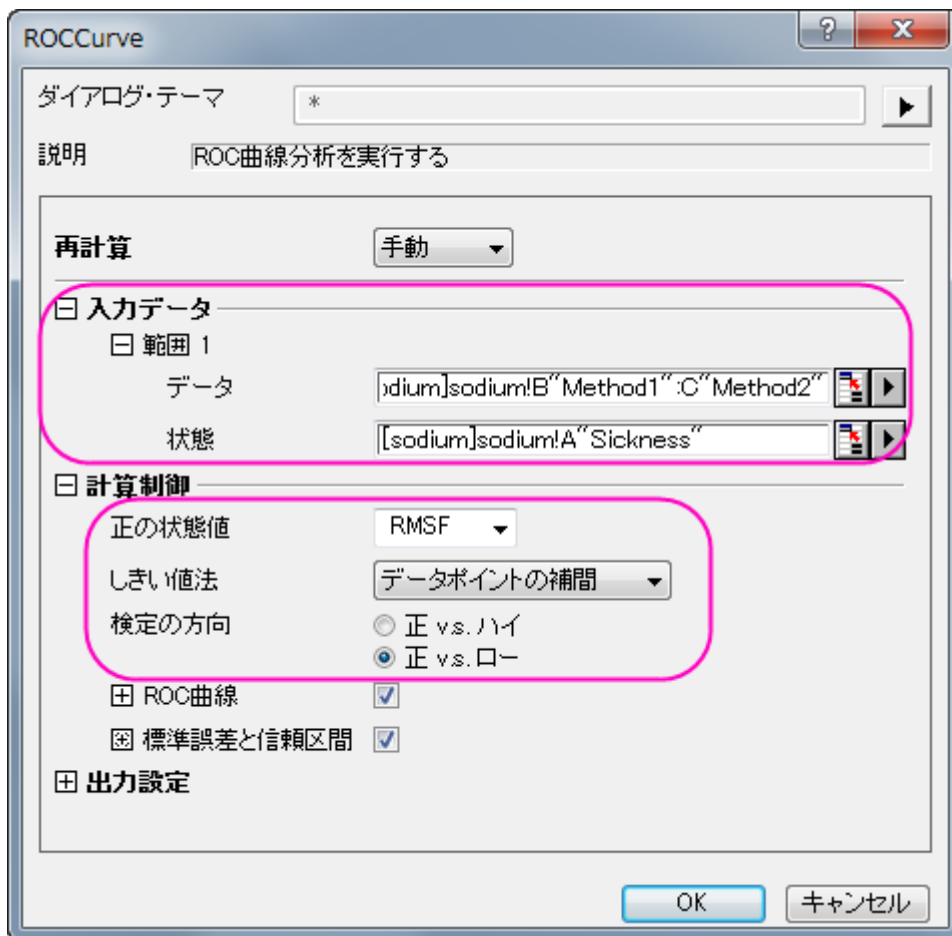
- ROC 曲線解析を行う
- 解析結果の読み取りを行う

ステップ

この例では、血清ナトリウムが RMSF(ロッキー山発疹熱)の診断の助けとなるかどうか判断するの研究を行います。

このデータは RMSF に感染した患者としていない人から血清ナトリウムを計測したものです。その際、2 種類の選別方法で計測されました。ROC 曲線解析は両方の手法のデータに対して行われ、血清ナトリウム値と RMSF の関係を調べて診断方法をよりよくできるか模索します。

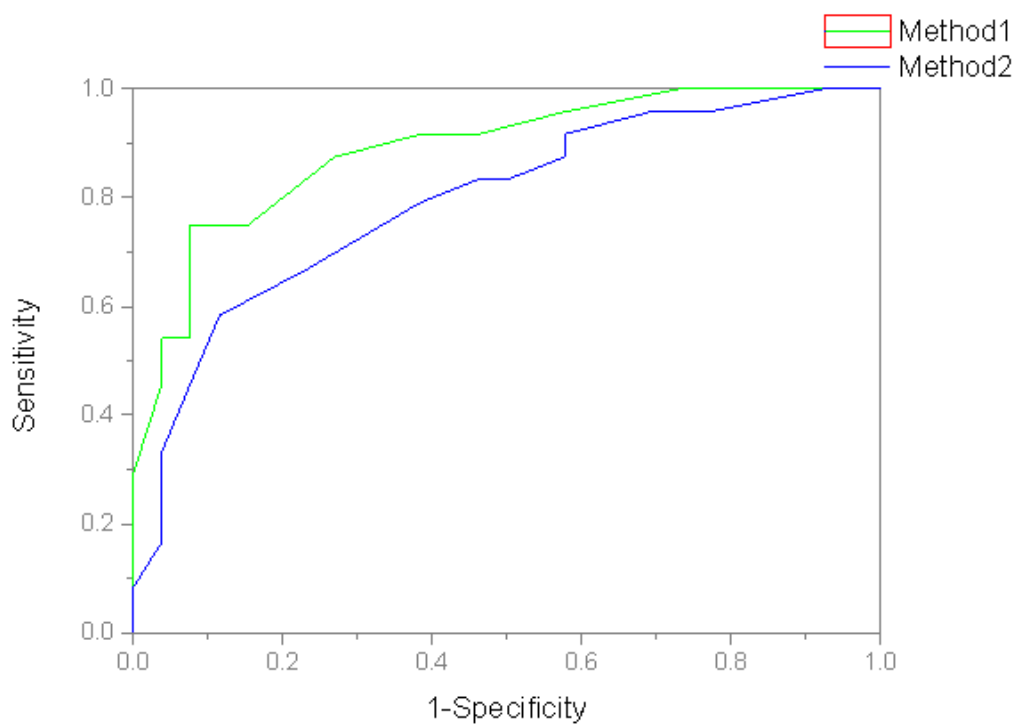
1. **単一 ASCII インポートボタン**  をクリックして `\Samples\Statistics` フォルダ内にある `sodium.dat` ファイルをインポートします。
2. **統計:ROC 曲線**と選択して ROC Curve ダイアログを開きます。
3. **入力データ** ブランチで列 **B(Method1)**と列 **C(Method2)**をデータとして、列 **A(Sickness)**を状態としてそれぞれ選択します。
4. 計算制御 ブランチでは、**正の状態値**に **RMSF** を設定し、検定方向では **正 v.s. ロー** を選択します。
5. 他の設定はデフォルトのまま **OK** ボタンを押して分析を行います。



結果の読み取り: ROC Curve1 ワークシートを開き、分析結果の表を開きます。

曲線以下の面積					
	面積	標準誤差	漸近確率	95% LCL	95% UCL
Method1	0.88862	0.04577	2.48984E-6	0.79892	0.97833
Method2	0.79407	0.06344	3.66257E-4	0.66972	0.91842

表から、両方の手法において**漸近確率**は 0.05 よりも小さいため、どちらの手法でも効果があると結論付ける事ができます。ROC 解析では面積が 1.0 に近いほど、良いテストであり、面積が 0.5 に近いほど悪いテストとなります。この解析では、method 1 の曲線以下の面積は 0.88862 で、method 2 の曲線以下の面積は 0.79407 となります。どちらの結果も 0.5 よりも大きくなっています。しかし、method 1 の面積の方が 1.0 に近いので、method 1 の方が method 2 よりも良い方法であるという事ができます。



更に、レポート内に出力されている ROC 曲線の形を分析する事もできます。method 1 の方が method 2 よりも精密に検査ができるようなので、method 1 の方が method 2 よりも良い手法であると結論付ける事ができます。

索引

2

- 2D FFT とフィルタ 330
- 2D ビン化 535
- 2 種類の関数を使ってコンボリューションフィットを行う 265

3

- 3D および等高線グラフ 21
- 3 変数の陰関数でフィット 291

C

- COX モデル推定法 612

F

- FFT と IFFT 301
- FFT フィルタ 307

G

- GNU Scientific Library を使ったユーザ定義フィット関数 194

I

- IIR フィルタ 325

L

- LabTalk 関数を使った積分フィット 210

N

- NAG ライブラリを使った積分フィット 205
- NAG ライブラリを使ってパラメータ制限がある積分関数をフィットする 201
- NAG 特殊関数でフィットする 198
- NLFit 内で LabTalk を使用してパラメータ初期化を行う 173

O

- Origin アプリ 39
- Origin の GUI 43

R

- ROC 曲線 658

S

- STFT (短時間フーリエ変換) 320

あ

- あるデータセットを別のデータセットの関数としてフィットする 189

う

- ウェーブレット 340

か

- カーブフィッティング
 - カーブフィッティング 25
- ガジェット
 - ガジェット 24
- カスタムレポートシートの作成 487
- カテゴリ値と共有 475
- カプランマイヤー推定法 605

く

- クイックシグモイダルフィットガジェット 108
- クイックピークガジェット 103
- クイックピークガジェットとピークアナライザを組み合わせ
て使用 394
- クイックフィットガジェット 94
- クラスターガジェット 83
- クラスター分析 626
- グラフテンプレートとバッチ作図 5
- グラフの出版 17
- グラフの統合と整列 13
- グローバル垂直カーソル 59
- クロス集計 528

こ

- コヒーレンスと相関 355
- コンボリューション 338
- コンボリューションしながらフィットする 226

し

- システム関数で非線形フィットを行う 153

す

- スムージング 313

ち

- チュートリアル
 - LabTalk 関数を使って 2 つの積分を含む関数でフィット 216
- チュートリアル: 非線形曲線フィット 144

て

- データの削減 446
- データフィルタ 457
- データ選択 9
- デシメーションと包絡線 362

の

- ノンパラメトリック検定概要 594

は

パラメータ共有でのグローバルフィット 164

ひ

ピークアナライザで基線のアンカーポイントを検索するスクリプトを使用する 389

ピークアナライザで基線の追加と減算を行う 382

ピークの検出とマーキング 400

ピークの積分 403

ピーク解析

ピーク解析 29

ピボットテーブル 466

ふ

フィットしながら総和を求める 221

ゆ

ユーザ定義フィット関数 178

ユーザ定義関数で曲面フィット 184

ユーザ定義関数で組み込み関数を引用する 230

れ

レポート用 Word テンプレートでのバッチ処理 504

わ

ワークシートクエリ 441

ワイブルフィット 615

漢字

一元配置の分散分析 559

鋭いピークの関数を積分でフィットする 250

音の処理 374

仮説検定 549

外部 Excel ファイルのサマリーレポートを出力するバッチ処理 503

各工程の前にスクリプトを使用したテーマによるバッチピーク解析 391

確率密度関数と累積分布関数による分布フィット 247

基線と一緒にピークフィットを行う 409

記述統計量 517

共有パラメータを使った異なる関数でのグローバルフィット 168

区間ごとに関数でフィットする 239

区分線形関数を使ってフィットする 255

繰り返し測定のある一元配置 ANOVA 565

検出力とサンプルサイズ 652

交差ガジェット 68

三元配置分散分析 586

事前セットされたピークパラメータを使ってピークフィットを行う 414

主成分分析 619

初めてのグラフ作成 1

常微分方程式によるフィット 260

積分ガジェット 63

線形フィットと外れ値の除去

線形フィットと外れ値の除去 129

組み込み関数の派生パラメータを修正する 281

直交距離回帰を使用した非線形曲線フィット 298

統計

統計 32

動画チュートリアル 41

動力学モデルのための線形フィット 133

特定の点を通るフィット曲線 242

二元配置 (繰り返し測定) ANOVA 576

二元配置 ANOVA 570

二元配置混合分析 581

判別分析 634

非定数のバックグラウンドを持つフィット関数 233

部分最小二乗 (Partial Least Squares) 643

複数データシートの分析テンプレートを使用したデータセットグループのバッチプロセス 511

複数データセットのバッチ処理 496

複数のガジェットを使用する 117

複数のデータセットで一つのフィットを行い、そのパラメータを使って他のデータセットのフィットを行う 286

複数の独立変数でフィットする 191

複数ピークによる表面フィット 276

複数ピークのパラメータの固定、共有の状態や境界を同時に設定する 421

複数変数による非線形フィット 278

複素関数でのフィッティング 223

分析テーマ 492

分析テンプレート 37

分析テンプレートの作成と利用 481

分析テンプレートを使用した複数ファイルのバッチ処理 499

分析におけるフィルタロック 462

分布フィット 540

偏相関係数 546

補間ガジェット 79

有理関数のパラメータ初期化 271

立ち上がり時間パネルツール 73

立ち上がり時間 367

列値の設定

列値の設定 426

列値の設定を使って分析テンプレートを作成する 483