

# CONTENTS

---

<b>サンプルの Experiment – Multippeak Fit Package</b> .....	2
例 1 : プログラムに慣れよう .....	2
例 2 : 非対称のピーク形状 .....	9
例 3 : 難しいデータの処理 .....	14
例 4 : 制約付きマルチプレット (Multiplet) にフィッティング .....	23
例 5 : 複雑なバックグラウンドを使う .....	28
以前のデータセットに戻る .....	35
セットを再開するもう一つの方法 .....	36

# サンプルの Experiment – Multipeak Fit Package

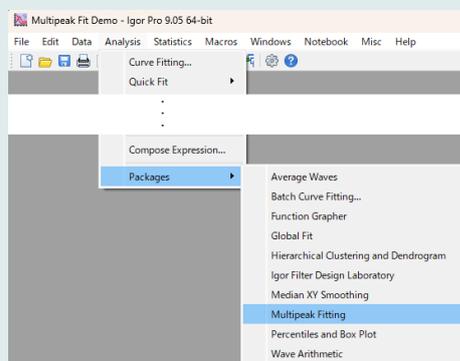
## ガイドツアー

### 例 1 : プログラムに慣れよう

#### 1. メニュー Analysis → Packages → Multipeak Fitting を選択します。

これにより、パッケージがロードされ、Start Multipeak Fit コントロールパネルが表示されます。

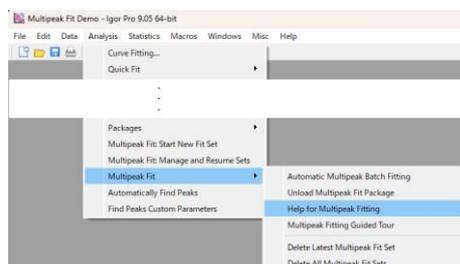
Analysis メニューに Multipeak Fit の項目も追加されます。



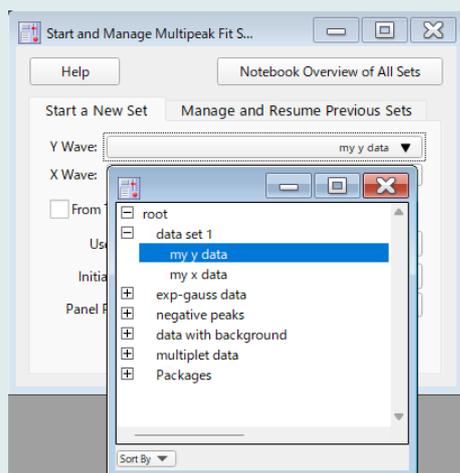
#### 2. メニュー Analysis → Multipeak Fit → Help for Multipeak Fitting を選択します。

ヘルプファイルには、Multipeak Fit の使い方に関する詳細な情報が記載されています。

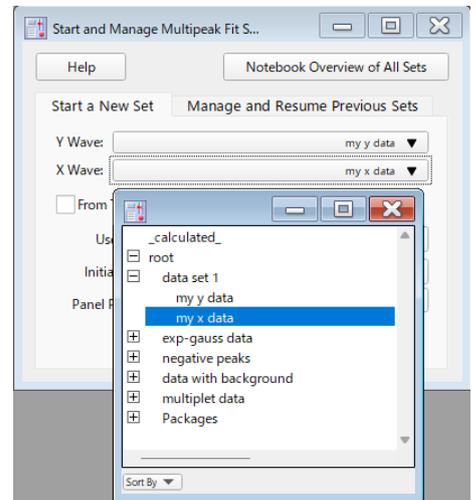
また、Start およびユーザーインターフェイス（後述）のヘルプボタンを押してヘルプを表示することもできます。



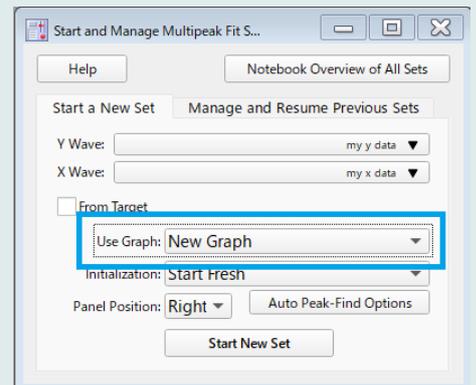
#### 3. Y Wave ポップアップメニューで、「data set 1」データフォルダーから「my y data」ウェーブを選択します。



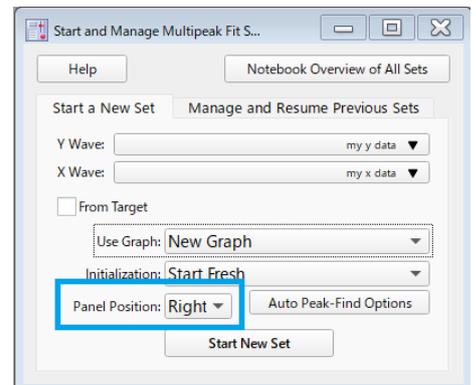
4. X Wave ポップアップメニューで、「data set 1」データフォルダーから「my x data」ウェーブを選択します。



5. Use Graph で New Graph が選択されていることを確認してください。



6. Panel Position で Right を選択します。



7. Start Set/Start New Set ボタンを押します。

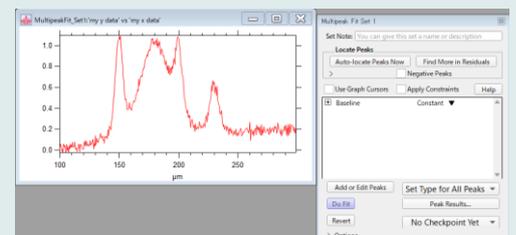
結果は、グラフと関連する外部のコントロールパネルです。コントロールパネルはグラフウィンドウに固定され、マルチピークフィットを行うために、グラフとコントロールパネルは密接に連携しています。

右のような表示になります。

グラフの名前が MultiplexFit\_Set1 となっていることに注目してください。

Igor の 1 つの Experiment で Multiplex Fit を使う場合、新しい Multiplex Fit セッションを開始するたびに「セット番号」が割り当てられます。

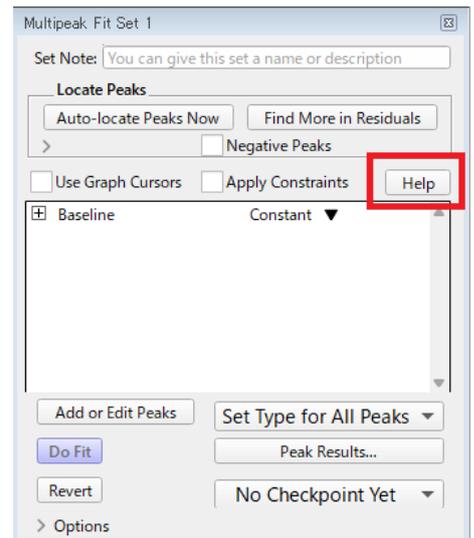
新しい Multiplex Fit セッションを開始するたびに、セット数が 1 ずつ増えていきます。



このセット番号は、特定のセッションのデータを追跡するときに使います。

## 8. コントロールパネルの右上にある Help ボタンをクリックします。

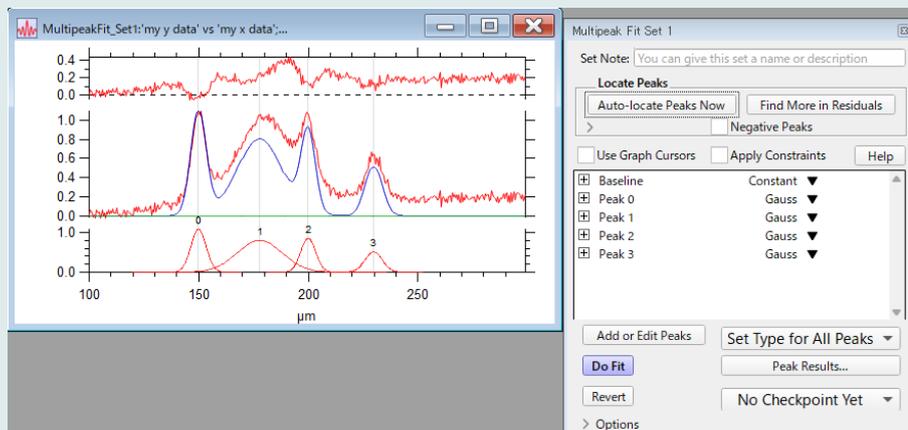
これは、ステップ 2 で見たヘルプファイルと同じものです。



## 9. Auto-locate Peaks Now ボタンをクリックします。

コントロールパネルの中央のリストには、ピーク検出機能がデータ内で検出したピークのリストが表示されています。

そして、グラフは個々のピークトレース、モデルカーブ、残差カーブで修正されます。



青いカーブはモデル、つまり、ピーク検出器によって推定された現在の計数セットから計算されたベースラインと、検出されたすべてのピークの合計を示します。

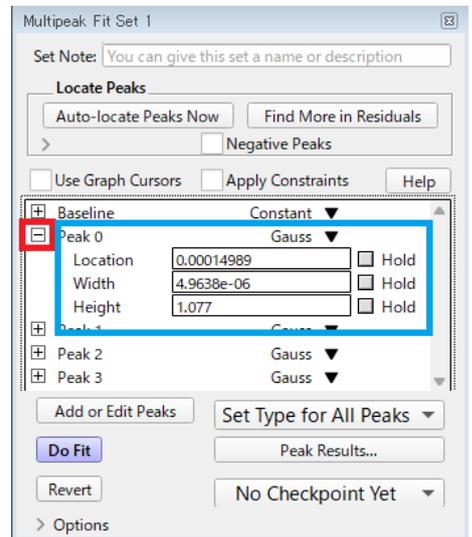
緑のカーブは、ベースラインの関数のみを示しています。

グラフの下の部分、足し合わせたものではなく、個々のピークを示しています。

一番上のトレースは、データセットと青いカーブの残差を示しています。

## 10. Peak 0 の左の展開記号（プラス記号）をクリックします。

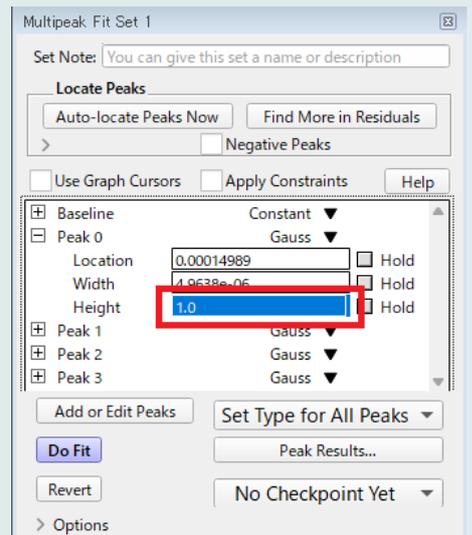
ピークフィット係数の値がチェックボックスとともに表示され、ピークフィット係数の値を保持することができます。



## 11. Height ラベルの右にある値セルをクリックします。

これにより、セルが編集モードになります。

例えば、値を 1.0 に変更し、Enter キーを押すか、セル外をクリックすると、Peak 0 の個々のトレースとモデルカーブのトレースの両方が変更されます。



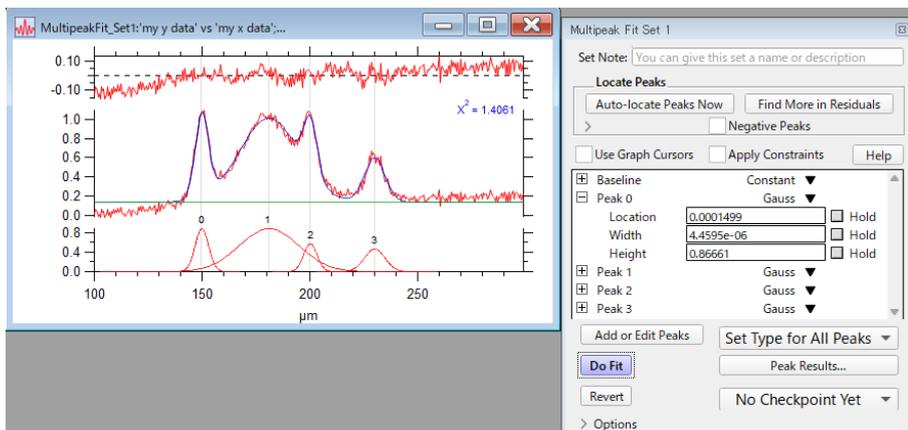
## 12. Do Fit ボタンをクリックします。

この例が選ばれたのは、うまくフィッティングするようにするためです。

ベースラインとピークの新しい係数を反映して、様々なトレースが更新されます。

カイ二乗値はグラフの右上に表示されます。

データに邪魔になる場合、このアノテーションを別の場所にドラッグすることもできます。



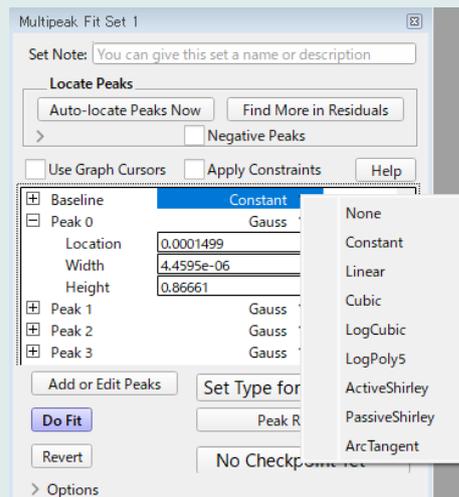
フィッティングがあまり良くないことがわかります。

上部の残差プロットから、バックグラウンドトレンドがあることがわかります。

青のフィットラインは、データトレースの左右両端のデータを通っていません。

### 13. ピークリストの Baseline 行で、Constant と表示されている箇所をクリックします。

Baseline 機能のメニューが表示されます。

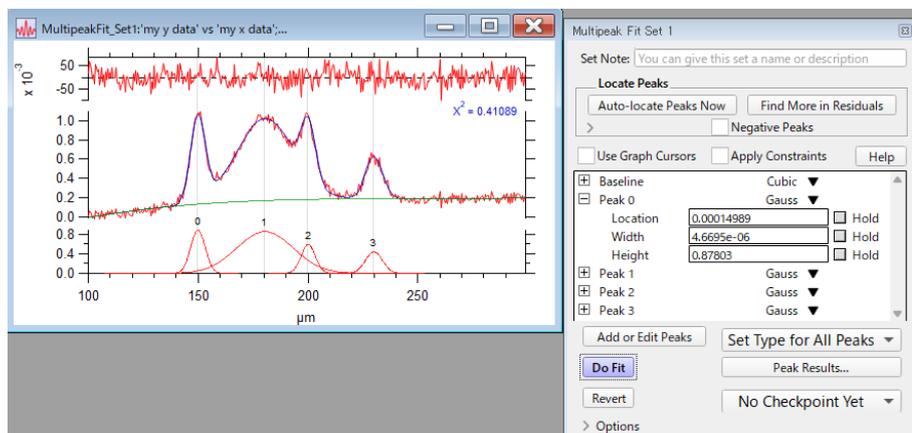


### 14. Cubic を選択して、Do Fit をもう一度クリックします。

良くなりました。残差はトレンドのないランダムな分布になりました。

Peak 0 の行のフィット係数の値が、フィット結果を反映するように更新されました。

しかし、ピークリストには、見積もり誤差や、実際にフィッティングされなかったピーク面積や半値全幅 (FWHM) などの情報は表示されません。

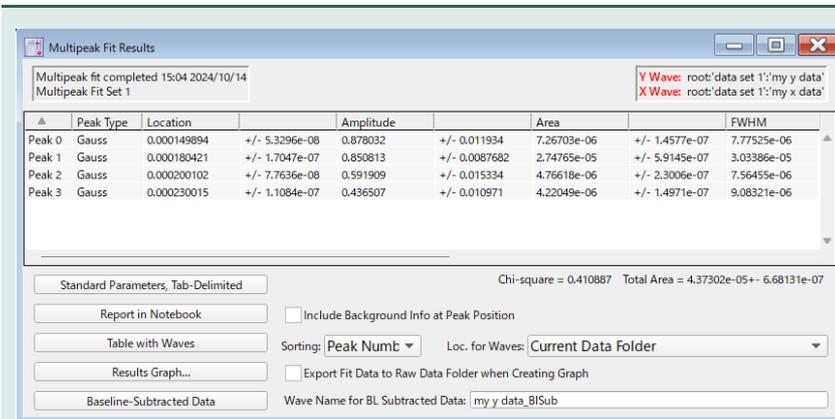


### 15. コントロールパネルの右下にある Peak Results ボタンをクリックします。

その結果、すべてのピークのリストと、ピークに関するさまざまな情報 (面積や FWHM など) が含まれる新しいウィンドウが開きます。

各情報には、誤差の推定値が含まれています。

横にスクロールすると、すべての情報を確認できます。



## 16. Amplitude タイトルセルをクリックしてください。

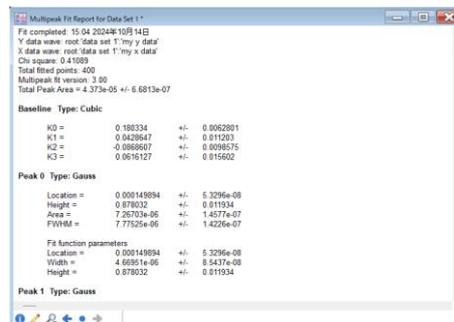
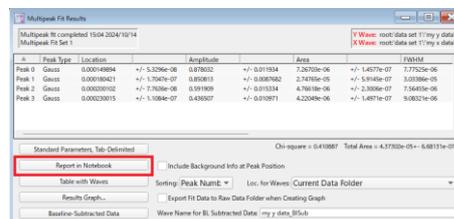
これは、ピークを振幅の小さな順から大きな順にソートします。

## 17. Amplitude タイトルセルをもう一度クリックしてください。

列のタイトルをクリックするたびに、ソート順が逆になります。

## 18. Report in Notebook をクリックしてください。

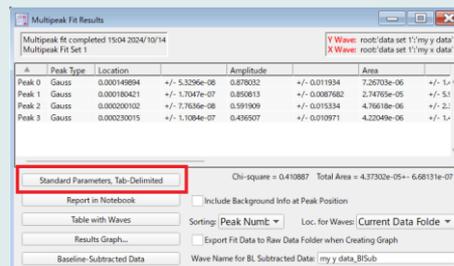
リスト内のすべての情報に加え、ベースラインに関する情報を含む、フォーマット済みのノートブックが生成されます。



## 19. Results ウィンドウに戻り、Standard Parameters, Tab-Delimited をクリックしてください。

各ピークに対して、ピークの種類、位置、振幅、面積、FWHMを、各パラメーターの推定誤差とともに、タブ区切りのプレーンテキストのノートブックが生成されます。

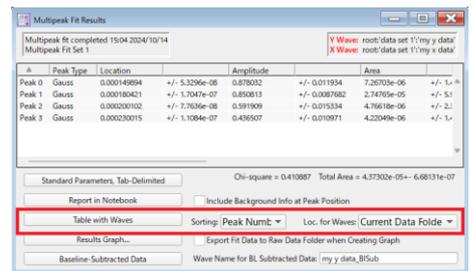
このノートブックは、この情報を別のプログラムにエクスポートするときの方法として使うことができます。



## 20. Results ウィンドウで、Table with Waves をクリックしてください。

これは、結果の値を複数のデータウェーブにエクスポートします。全体的な概要、各ピークとベースラインに対して1つです。また、このデータのテーブルを表示します。

Table with Waves ボタンの隣にあるオプションを使って、これらのウェーブの位置とテーブル内の値の並べ替えを選択することができます。

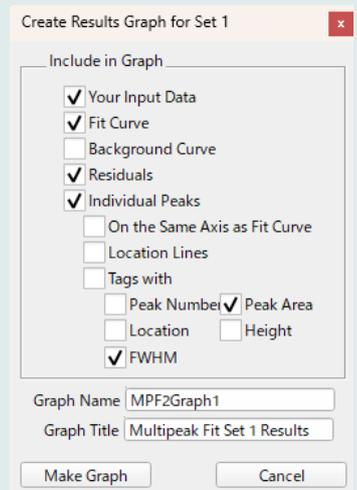
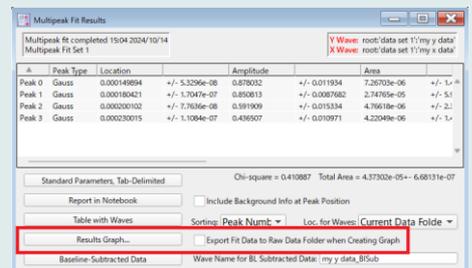


## 21. Results ウィンドウで、Results Graph をクリックしてください。

データとフィッティングのグラフを作るための別パネルを表示します。

ここでは、グラフを作成する前に、グラフに含める情報を選択することができます。

Table with Waves ボタンの隣にあるオプションを使って、これらのウェーブの位置とテーブル内の値の並べ替えを選択することができます。



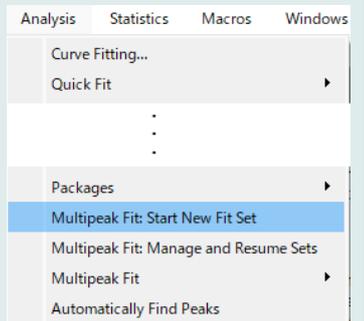
## 例 2 : 非対称のピーク形状

新しいデータを使って始めます。

メニュー Analysis → Packages → Multipeak Fitting を選択し、Analysis メニューに Multipeak Fit の項目があるところからです。

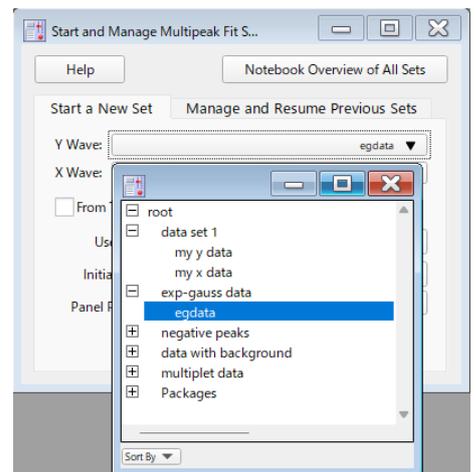
### 1. メニュー Analysis → Multipeak Fit: Start New Fit Set を選択します。

Start and Manage Multipeak Fit コントロールパネルが表示されます。

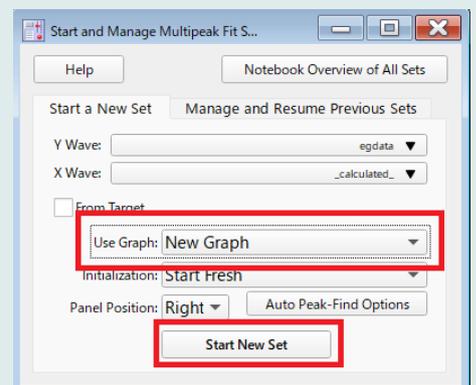


### 2. Y Wave ポップアップメニューで、「exp-gauss data」データフォルダーから「egdata」を選択します。

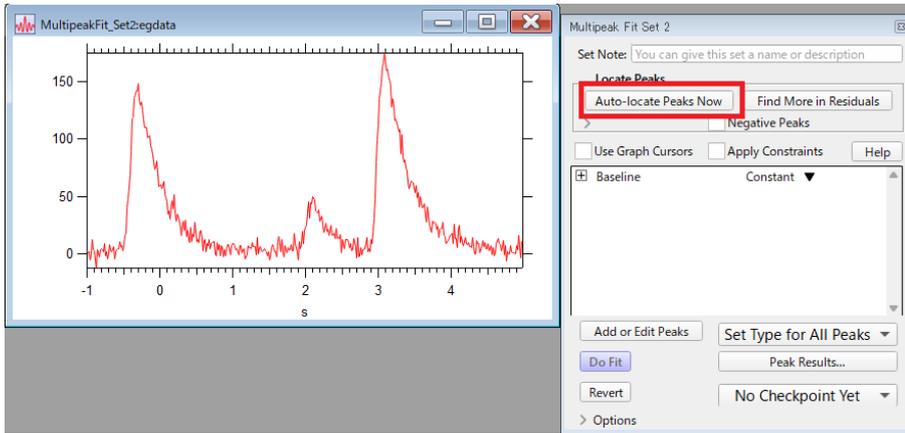
X Wave ポップアップメニューで、「\_calculated\_」を選択します。



### 3. Use Graph ポップアップメニューで New Graph を選択し、Start New Set ボタンをクリックしてください。



次のようなデータが表示されます。



#### 4. Auto-locate Peaks Now ボタンをクリックします。

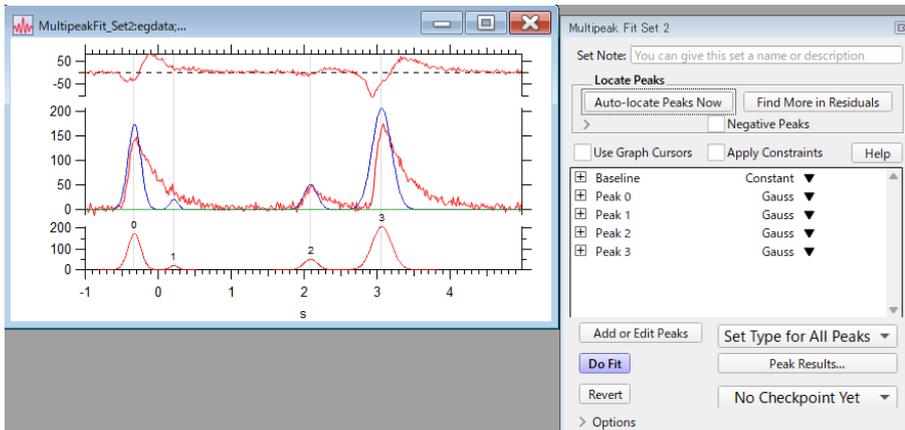
この（ダミーの）データセットは、指数関数的に修正されたガウスピークを使って作られたため、ピークは非対称で、ピーク検出器の標準的なガウスピークはうまく適合しません。

実際、データが非対称であるため、ここでは4つのピークが推測されています。

現在の Auto-locate 設定では、ピーク検出器は左端の形状の下に2つのピークがあると考えています。

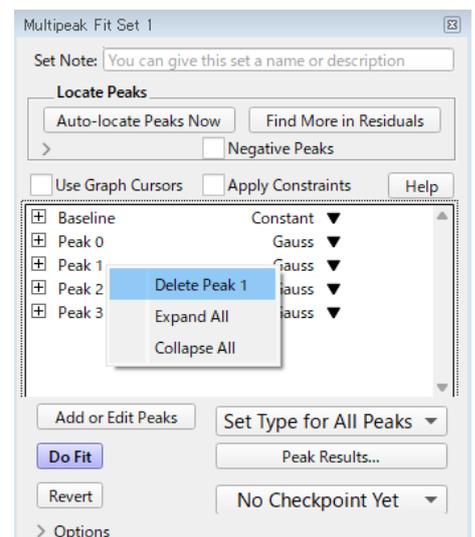
これは自動推測オプションを調整することで修正できます（例3を参照）。

しかし、余分なピークは1つだけなので、これを削除します。



#### 5. Multipeak Fit パネルのピークのリストから Peak 1 を右クリックして、Delete Peak 1 を選択します。

しかし、ピークは依然として対称（ガウス）であるため、ここではうまく機能しません。

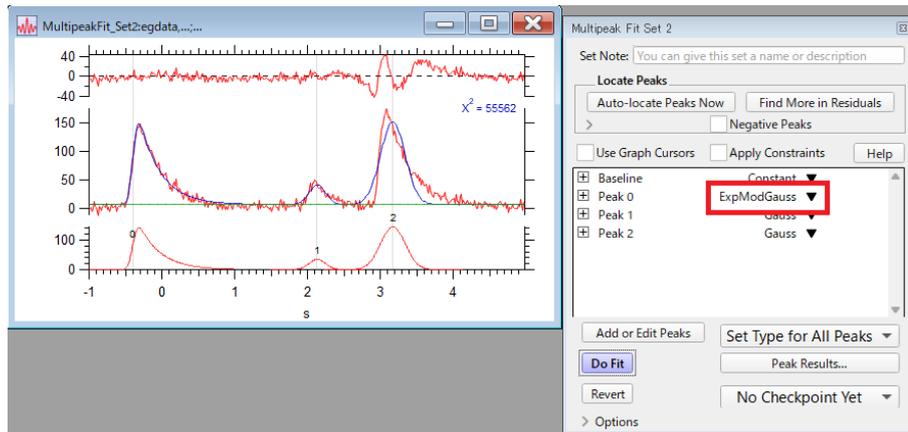


**6. Peak 2 の行で、Gauss の隣にある下向きの矢印をクリックし、ExpModGauss を選択します。Do Fit をクリックします。**

確かに、このピークにはこのほうが合っているように見えます。

Multipeak Fit を使うと、異なるピーク形式を1つのフィッティングに混在させることができます。

しかし、ここでは適切ではありません。



**7. 各ピークで行でピーク形式メニューを使う代わりに、リストの下の Set Peak Type for All Peaks ポップアップメニューを表示します。**

**ExpModGauss を選択します。**

**Do Fit をクリックします。**

これで、すべてのピークが非対称型となり、うまくフィッティングしました。

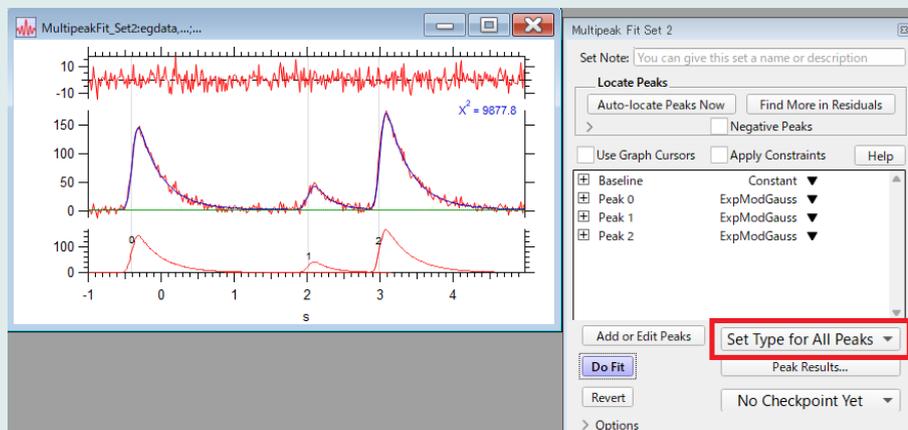
しかし、ピークが特に非対称である場合、例えば Peak 2 のようにグラフ上の灰色の線がピークの最大値と一致しないことに注意してください。

このピーク形式の位置パラメーターは GaussX0- です。これがガウスピークの中心です。

しかし、指数関数との畳み込みはピークの形状を変化させ、ガウス分布のピーク的位置からピークの最大値をずらします。

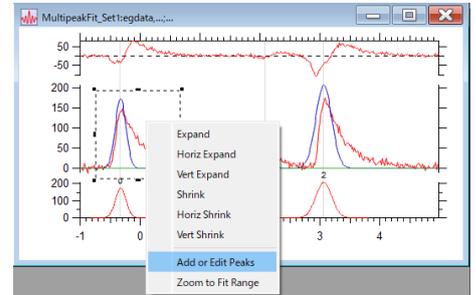
今はこのままでもフィットしますが、フィッティングする前に手動で Peak 0 を非対称の形により近づけたいとします。

(これは、ずれの適切な大きさや方法を見つけるのが難しい場合に必要になるかもしれません)

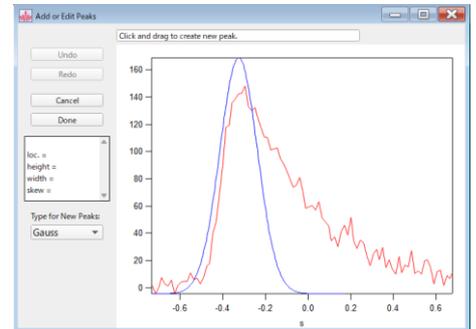


## 8. -0.7 から 0.7 の範囲をカバーするマーキーをドラッグして描画します。

マーキー内をクリックし、Add or Edit Peaks を選択します。



マーキーで選択したデータの範囲と、その範囲内のピークの個々のトレースを示すグラフが作成されます。

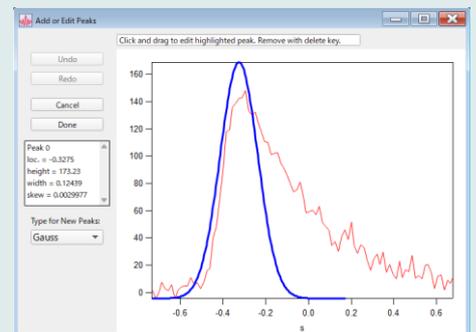


## 9. 編集したいピークのトレースにマウスカーソルを合わせます (1つのみ)。

マウスがトレース上を通過すると、トレースがハイライトされます。

これは、クリックすると新しいトレースが作成されるのではなく、そのトレースの編集が開始されることを示しています。

誤って新しいピークを作成してしまった場合は、元に戻す、またはキャンセルして、やり直してください。



## 10. ピークトレースがハイライトされた状態で、ピークをクリックしたまま新しい位置までドラッグし、マウスボタンを離します。

ピークの位置は、次のステップに進むには十分に良好であるはずなので、ここではあまり調整をする必要はありません。

## 11. 幅/高さの編集モードにはいります。

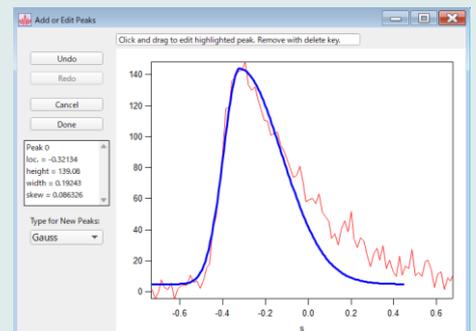
縦の動きはピークの高さを変え、横の動きは幅を変えます。

シフトキーを押して行くと、マウスの動きに合わせてピークが歪みます。

シフトキーを押しながらマウスを動かし、データの形におおむね一致するまでピークの非対称性を調整します。

ここでは正確である必要はありません。大まかな形状の予測で十分です。

この編集ウィンドウでの表示は、表示目的のみであり、Multiplex Fit グラフの実際のピークと完全に一致するものではないことに注意してください。



## 12. 希望するピークになったら、クリックします。

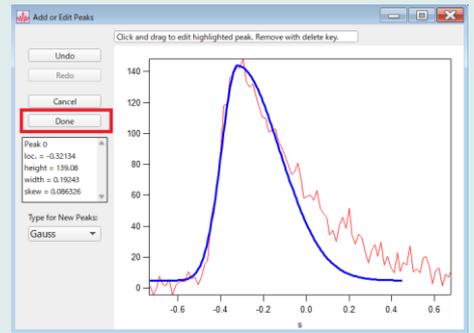
最後のクリックで編集モードを終了します。

## 13. Done ボタンをクリックします。

ピーク形状は、新しい非対称の設定を反映して更新されているはずです。

更新されない場合、おそらくピーク形状として ExpModGauss を選択し忘れていていると思われます。

ガウス分布のような対称なピーク形状は、このように形状を編集しても非対称にすることはできません。



## 14. Do Fit ボタンをクリックします。

## 15. Peak Results ボタンをクリックします。

Location とラベル付けされた列には、GaussX0 の値とはやや異なる値が入力されています。

これが本当のピーク最大値の位置です。

結果リストのこの列は、常にピーク最大値の実際の位置です。

#	Peak Type	Location	Amplitude	Area	
Peak 0	ExpModGau	-0.316456	(Not Available)	144.433	(Not Available)
Peak 1	ExpModGau	2.0941	(Not Available)	41.087	(Not Available)
Peak 2	ExpModGau	3.07997	(Not Available)	168.472	(Not Available)

次の列には、位置の推定誤差が表示されるべきですが、(Not Available) と表示されています。

このピーク形式には、実際のピーク最大値の解析式はありません。

値は Optimize コマンドを使って数値的に計算されています。

したがって、誤差の推定値はありません。

Amplitude の列は、真のピーク振幅です。

フィッティング関数の高さ係数は、ガウスピークの高さです。

指数で畳み込まれた後の実際のピークは、振幅が小さくなります。

この場合も、真の振幅の解析式は存在しないため、誤差推定の列には (Not Available) と表示されます。

これは、FWHM の列についても同じです。

この場合、ピークの FWHM は FindRoots コマンドを使って求められます。

ExpModGauss ピーク形式の Result リストには、標準の位置、振幅、面積、FWHM の列に加えて、その下にあるガウスピークの位置、高さ、FWHM が表示されます。

この面積は、下にあるガウスピークの間積と同じです。

## 16. Report in Notebook ボタンをクリックします。

ここでは、単純に欠落しているエラー推定値が表示されません。

Parameter	Value	Units
Baseline Type	Constant	
y0	2.33904	± 0.42339
Peak 0 Type	ExpModGauss	
Location	-0.316456	
Height	144.433	
Area	64.9075	± 2.1865
FWHM	0.34732	
Gauss Loc	-0.398454	± 0.0018402
Gauss Height	496.107	± 22.63
Gauss FWHM	0.12291	± 0.0053085
Exp Tau	0.322934	± 0.0077544
Fit function parameters		
GaussX0	-0.398454	± 0.0018402
GaussWidth	0.0251951	± 0.002543
Height	496.107	± 22.63
ExpTau	0.322934	± 0.0077544

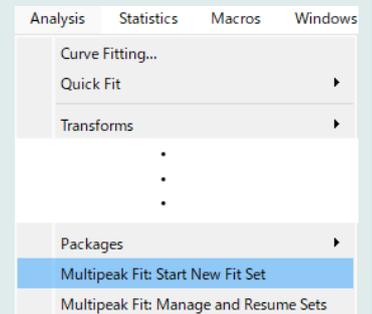
### 例 3 : 難しいデータの処理

新しいデータを使って始めます。

メニュー Analysis → Packages → Multipeak Fitting を選択し、Analysis メニューに Multipeak Fit の項目があるところからです。

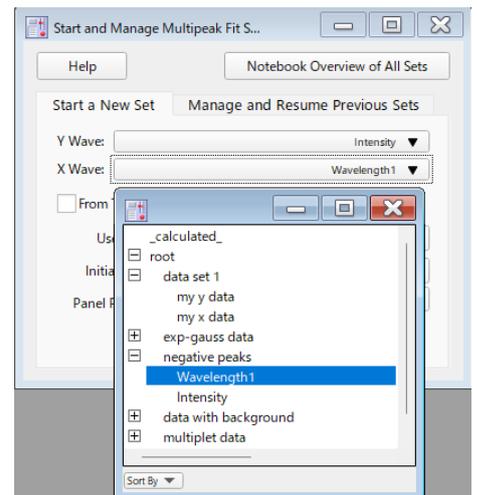
#### 1. メニュー Analysis → Multipeak Fit: Start New Fit Set を選択します。

Start and Manage Multipeak Fit コントロールパネルが表示されます。



#### 2. Y Wave ポップアップメニューで、「negative peaks」データフォルダーから「Intensity」を選択します。

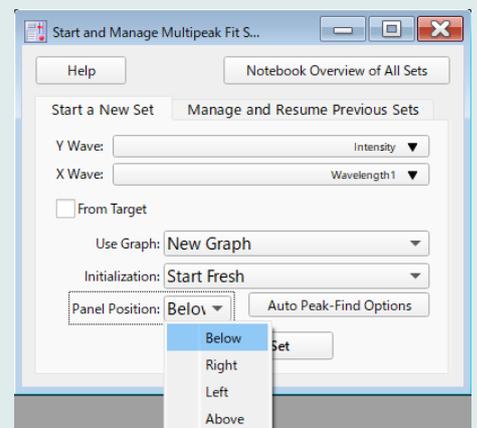
X Wave ポップアップメニューで、「Wavelength1」を選択します。



#### 3. Panel Position メニューから Below を選択します。

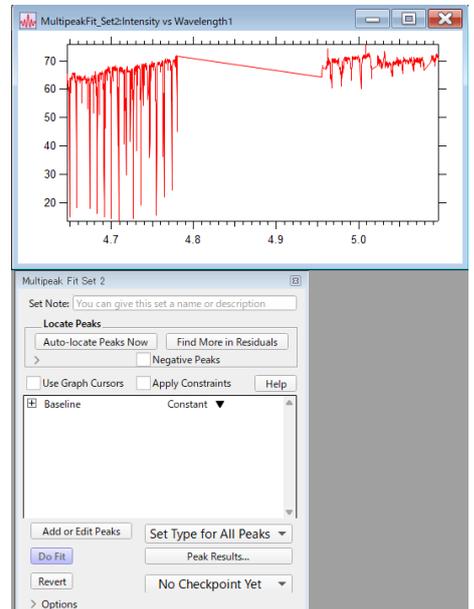
ピークがたくさんあるため、グラフを大きくしたいかもしれません。

そのためコントロールパネルを下部に配置すると便利です。



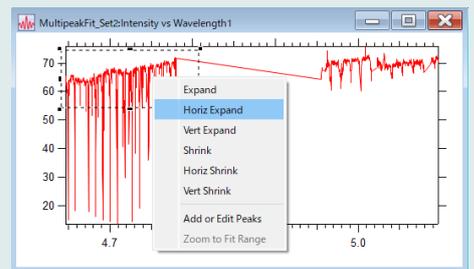
#### 4. Start New Set ボタンをクリックします。

データ間に大きなギャップがあり、右端のデータはゴミです。

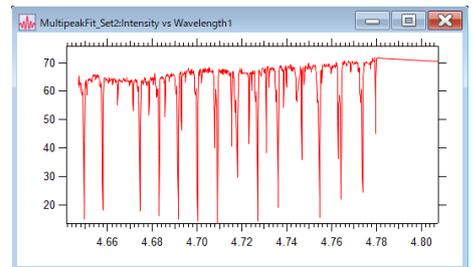


#### 5. 左端のデータの周りにマーキーを作成し、その内側をクリックして Horiz Expand を選択します。

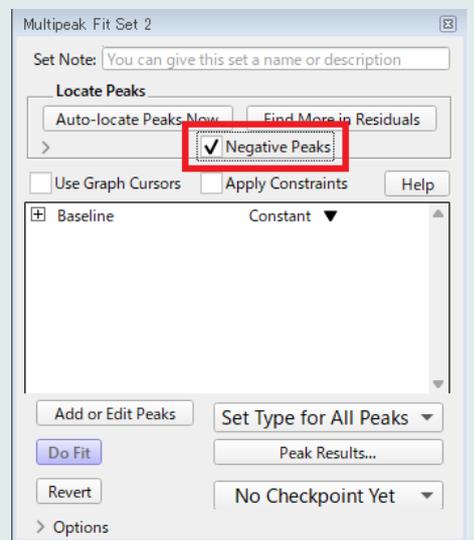
マーキーで選択したデータの範囲と、その範囲内のピークの個々のトレースを示すグラフが作成されます。



#### 6. たくさんのピークがあります。グラフウィンドウを広げて、何が起きているかを確認してください。



#### 7. ピークが下に伸びているため、Negative Peaks チェックボックスをチェックしてください。



## 8. Auto-locate Peaks Now ボタンをクリックしてください。

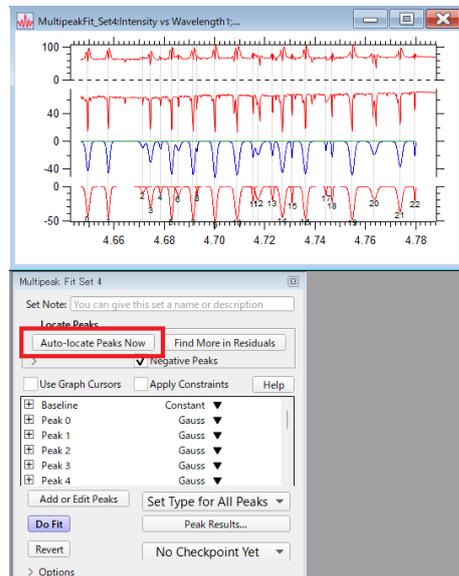
結果は悪くはありませんが、素晴らしいというわけでもありません。

データには大きな垂直オフセットがあり、モデルはそれを考慮していません。

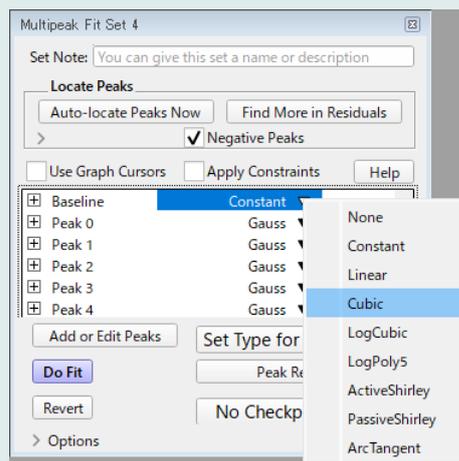
ピークが広すぎ、いくつかの個所では、本来2つのピークがあるべきところが、幅の広い1つのピークとなっているところもあります。

また、小さなピークの大部分を見逃しています。

ここでは、22 のピークが見つかりました。

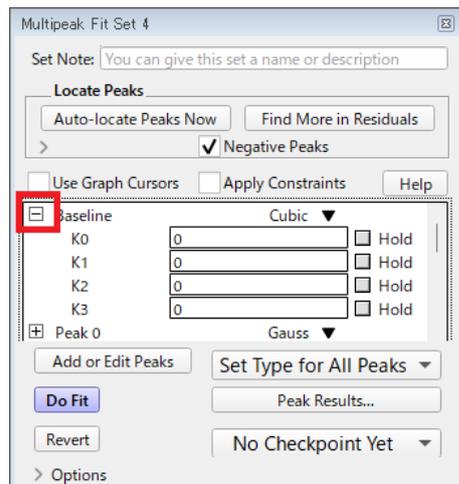


## 9. Baseline の行の Constant をクリックして、Cubic を選択してください。



## 10. Baseline の行の左端にある「+」アイコンをクリックします。

Baseline セクションが開き、係数セルが表示されます。

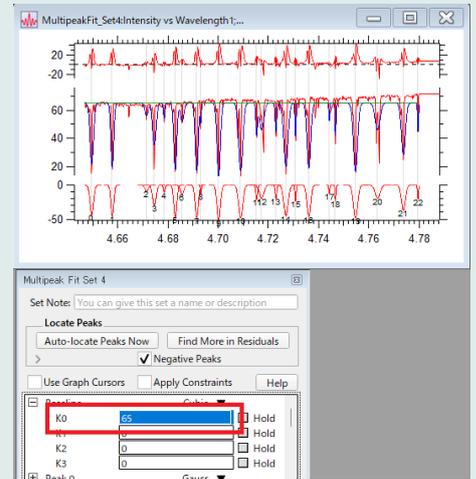


**11. K0 の値セルをクリックして編集モードに入ります。65 を入力して Enter キーを押します。**

モデルカーブをオフセットしたので、データにほぼ重なるようになりました。

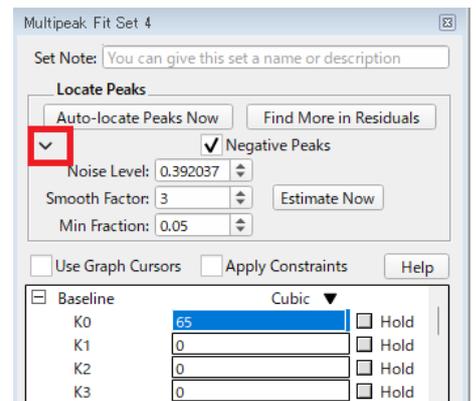
これで、2つを実際に比較することができます。

広すぎるピークは、自動ピーク検出器のスムージング係数が大きすぎることを示すサインです。



**12. Locate Peak セクションの左下の三角アイコンをクリックして、折りたたまれたものを開きます。**

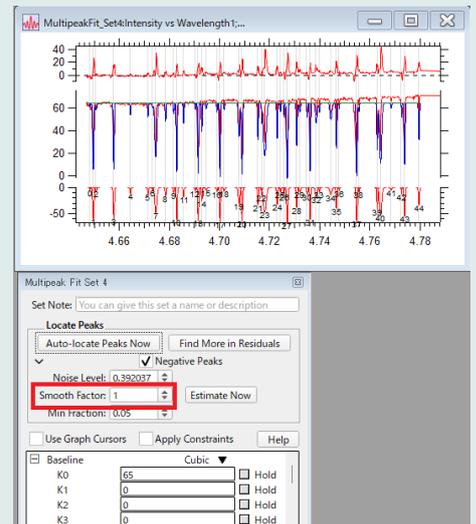
いくつかの新しいコントロールが表示されます。



**13. Smooth Factor を 1 に変更し、Auto-locate Peaks Now をもう一度クリックします。**

これまで1つのピークとして検出したものの一部を、複数のピークとして検出しています。

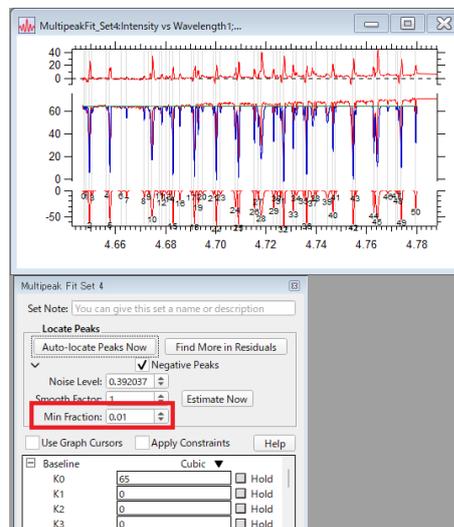
ピーク幅はデータによりよく適合しています。ここでは、44 のピークが検出されました。



## 14. Min Fraction を 0.01 に変更し、Auto-locate Peaks

Now をもう一度クリックします。

いくつかの小さなピークが拾い上げられています。  
これで 50 のピークとなりました。



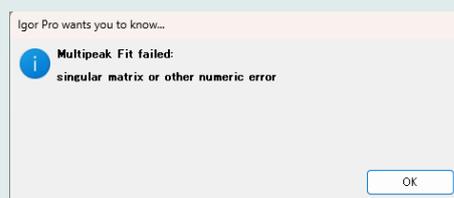
## 15. Do Fit ボタンをクリックします。

しばらくすると、Multiplex Fit が特異行列エラーにより失敗したことを示すアラートが表示されます。

多数のピークをフィッティングすることはよくあることですが、このアラートは、フィッティングが袋小路に入り、出口を見つけられなかったことを意味しています。

いくつかのピーク（特にピーク 28）の幅が広すぎるのがわかります。

これは、狭すぎる最初の見積もりよりも、フィッティングの問題を可能性が高くなります。



## 16. Min Fraction の設定を 0.05 に戻し、Auto-locate Peaks Now をもう一度クリックします。

ここまで見てきたように、多くのピークを持つデータセットでは、のぞく結果を得るために多くの調整が必要となります。

最初からあまりにも多くの小さなピークを合わせようとしても、うまくいかないことがあります。

もし、フィッティングから小さなピークが抜けている場合は、大きなピークのフィッティングを初期段階で行うことで、よりよい出発点を見つけ、それらのピークを後から追加できるかもしれません。

## 17. Do Fit ボタンをクリックして、一度元に戻ります。

このフィッティングは悪くありません。

フィッティングされていないいくつかの小さな山（谷）があります。

データセット内のすべての山（谷）を本当に合わせる必要があるかを判断する必要があります。

ピーク 37 には、まだフィッティングされていない左側のピークがあるように見えます。

残差もこの位置で大きな負の値を示しています。

この欠落しているピークを追加する方法は 1 つだけではありません。

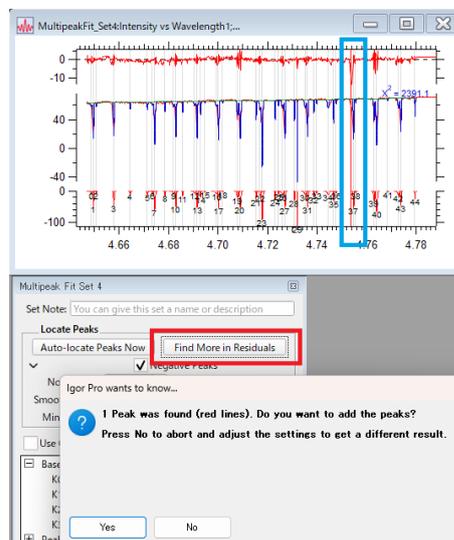
以下では 2 つの方法を試してみます。

18. ピーク 37 の左側にピークを追加して、その部分の凹凸を補正しましょう。

**Find More in Residuals をクリックします。**

新しいピークが見つかった位置に赤い線は追加されていますが、ピークはまだ追加されていません。

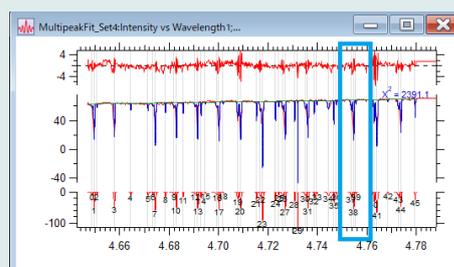
ピークを本当に追加してよいかを確認するアラートが表示されます。



19. **Yes をクリックします。**

これで、検出されたピークが正しく追加されます。  
No をクリックすると、ピークは追加されません。

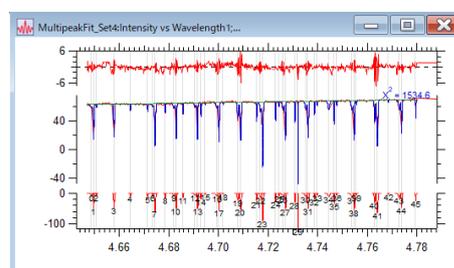
ピーク検出器の結果に満足できない場合のために、これを覚えておいてください。



20. **Do Fit ボタンをクリックします。**

凹凸がなくなり、うまくフィッティングできました。

Find More in Residuals ボタンがデータの正しいピークを見つけられない場合は、満足のいく結果が得られるまで自動検索の設定を微調整してみることもできます（ここではその必要はありません）。



以下では、欠落したピークを処理する別の方法について説明します。  
もし不要であれば、次の例に進んでください。

どのように行っても、自動ピーク検出器が正しいピークを見つけられないことがあります。

手動でピークを追加する方法も試してみます。

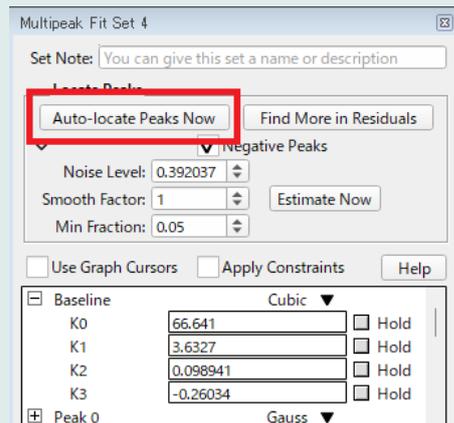
21. **Auto-locate Peak Now ボタンをもう一度クリックします。**

これにより、すべてのピークが削除され、もともと見つかった 44 のピークが追加されます。

2つのボタンの異なる動作に注意してください。

Find More in Residuals ボタンは現在のリストに追加するのに対し、Auto-locate Peaks Now ボタンは常に最初からやり直します。

これで、基本的には手順 16 の状態に戻ったこととなります。

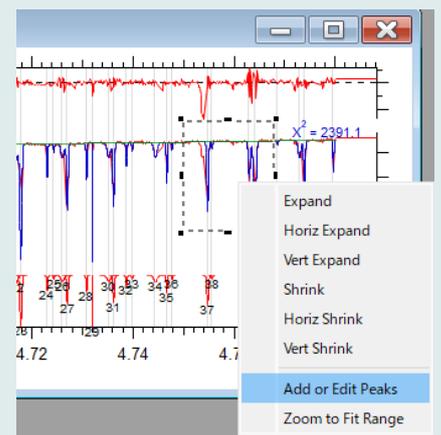


## 22. Do Fit ボタンをクリックします。

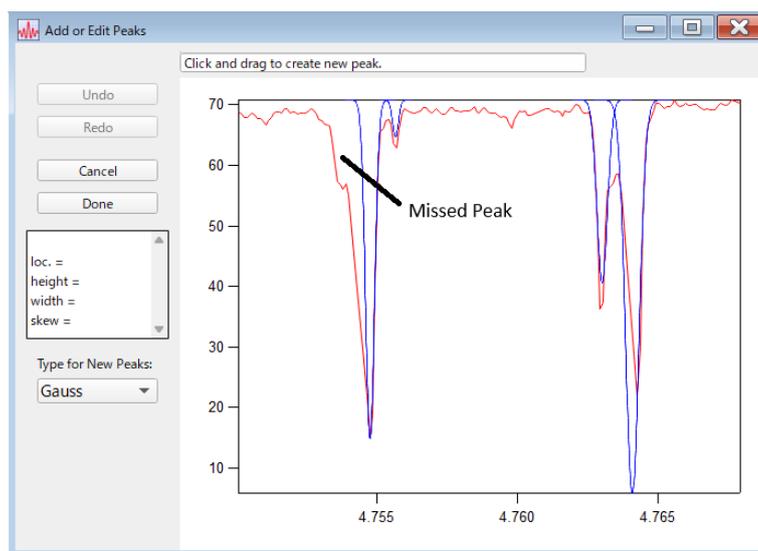
残差の凹凸が戻ってきます。

## 23. 4.75 から 4.77 の範囲をカバーするマーキーを描きます。

マーキー内をクリックし、Add or Edit Peaks を選択します。



マーキーで選択したデータの範囲と、その範囲内のピークの個々のトレースを示すグラフが表示されます。



個々のピークトレースのテール部分はベースラインとあまりうまく一致していません。

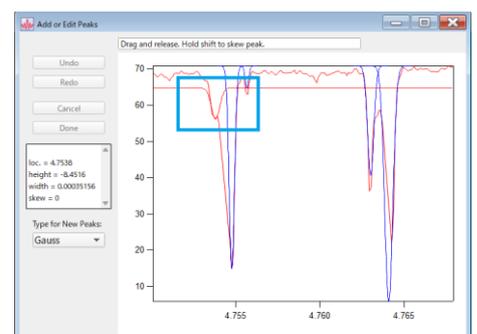
それらを整列させるアルゴリズムはあまりよくありません。

しかし、それは問題ではありません。ピークの垂直オフセットは、フィッティング手順の一部ではないためです。

## 24. 見逃したピーク、極端なポイントにマウスを移動します（ピークの最も低い部分、これらは負のピークです）。 クリックして、右上にドラッグします。

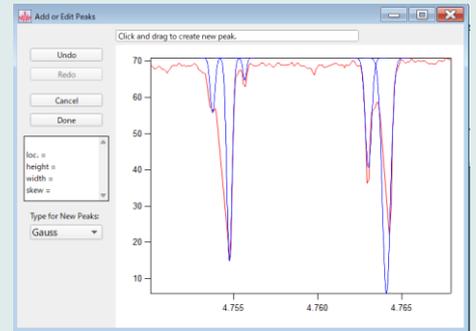
こうすると、ピークトレースが描画されます。

クリックした場所がピークの点となり、垂直方向の動きで高さを設定し、水平方向の動きで幅を設定します。



## 25. かなりよさそうになったら、マウスボタンを離します。

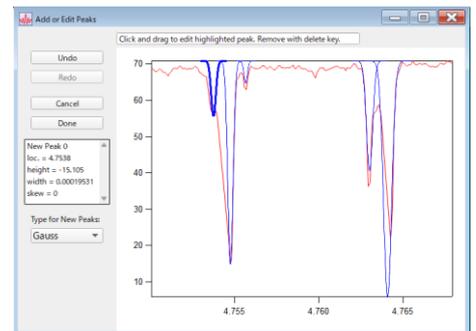
グラフに新しいピークトレースが追加されました。



仮に、正しい場所に置けなかった場合。。。

## 26. 追加したトレースにマウスを移動します。

マウスがトレース上を通過すると、トレースがハイライトされます。これは、クリックすると新しいトレースが作成されるのではなく、そのトレースの編集が開始されることを示しています。



## 27. 追加したトレースにマウスを移動します。

新しいトレースがハイライトされた状態で、ピークをクリック&ドラッグして新しい位置に移動し、マウスボタンを離します。

**28.** これで、幅/高さの編集モードに入ります。  
垂直方向の動きはピーク高さを、水平方向の動きは幅を変更します。

## 29. 目的のピークになったら、クリックします。

この最後のクリックで編集モードを終了します。

## 30. Undo ボタンをクリックします。

ピークは編集前の位置に戻ります。

## 31. もう一度 Undo ボタンをクリックします。

ピークを追加することが編集の1つ前のステップであったことから、追加したピークが削除されます。

## 32. Redo ボタンをクリックします。

新しいピークが復活します。

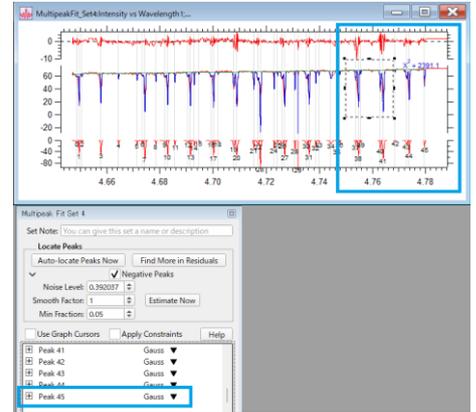
## 33. もう一度 Redo ボタンをクリックします。

位置や形を編集したピークに戻ります。Undo/Redo は、何段階でも可能です。

### 34. Done ボタンをクリックします。

現在、リストには 45 のピークが含まれています。

新しいピークはピークリストに正しい位置に挿入され、ピークは追加されたピークを反映するように番号が付けなおされます。

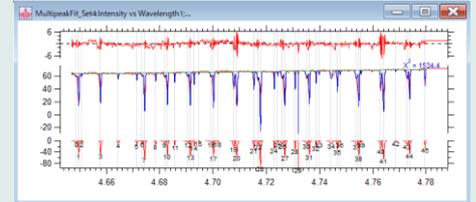


### 35. Do Fit ボタンをクリックします。

あまりにも広いピークを作成していなければ、手順 20 と同様にフィッティングが成功するはずです。

必要に応じて、Add or Edit Peaks 機能を使って、フィッティングすることができます。

どんどん良くなっています。このデータセットで作業をしているとき、50 以上のピークがありました。



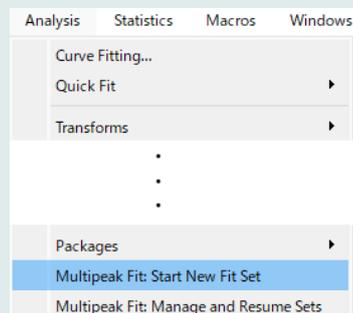
## 例 4 : 制約付きマルチプレット (Multiplet) にフィッティング

新しいデータを使って始めます。

メニュー Analysis → Packages → Multiplet Fitting を選択し、Analysis メニューに Multiplet Fit の項目があるところからです。

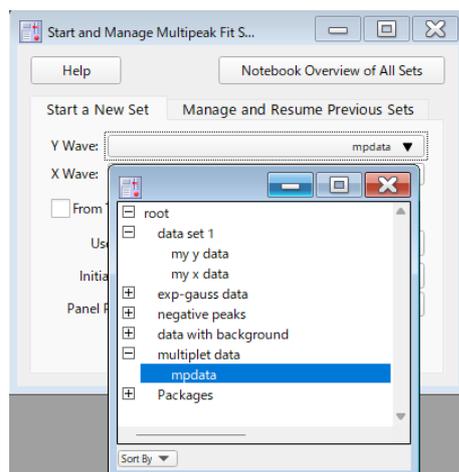
### 1. メニュー Analysis → Multiplet Fit: Start New Fit Set を選択します。

Start and Manage Multiplet Fit コントロールパネルが表示されます。



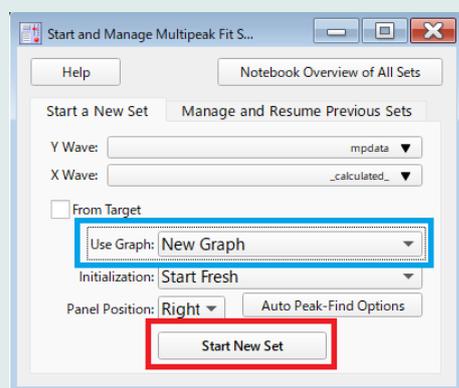
### 2. Y Wave ポップアップメニューで、「multiplet data」データフォルダーから「mpdata」を選択します。

X Wave ポップアップメニューで、「\_calculated\_」を選択します。



### 3. Use Graph で、New Graph が選択されていることを確認してください。

Start New Set ボタンをクリックします。

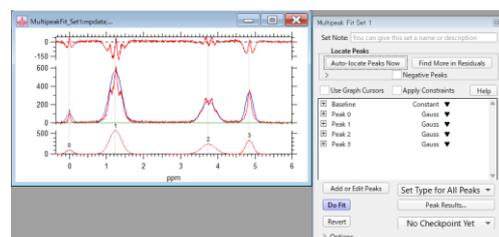


### 4. Auto-locate Peaks Now ボタンをクリックします。

このデータセットには、複数の重なり合ったピークがマルチプレットとしてグループ化されているようです。

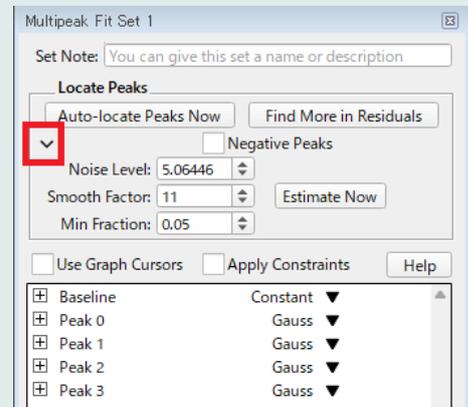
推定設定による Auto-locate 関数では、個々のピークを識別することができず、マルチプレットセットごとに1つのピークを割り当てただけです。

例 3 と同様に、Auto-locate の設定を少し調整する必要があります。



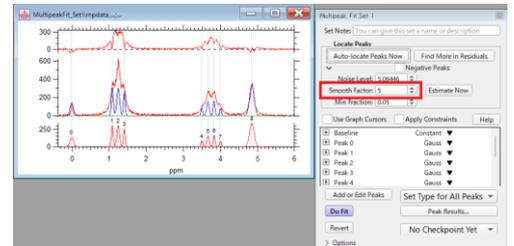
## 5. Locate Peak セクションの左下の三角アイコンをクリックして、折りたたまれたものを開きます。

重なり合うピークを認識させるには、Smooth Factor の設定を微調整する必要があります。



## 6. Smooth Factor を 5 に変更し、Auto-locate Peak Now をもう一度クリックします。

ずいぶんよくなりました。8つのピークが正しく表示されています。

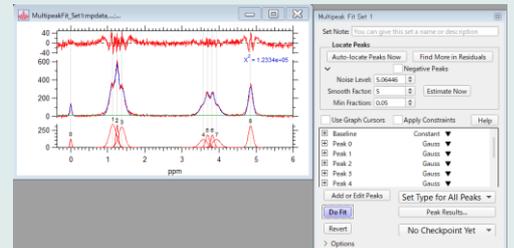


## 7. Do Fit ボタンをクリックします。

フィッティングは収束したものの、いくつかの点で満足のものではありません。

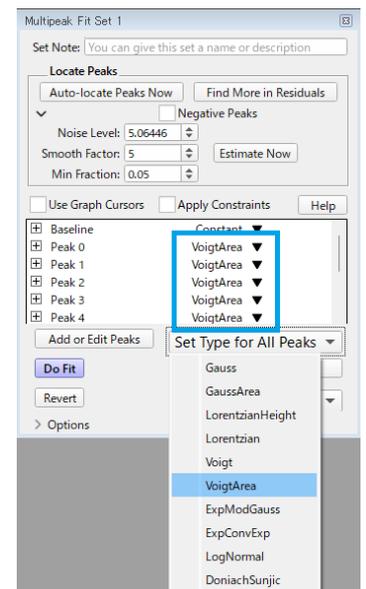
まず、デフォルトのガウスピークの形状では、データにうまく一致していないように見えます。

また、すべてのピークの幅が大きく異なっています。これは正しくないようです。



## 8. Set Type for All Peaks ボタンをクリックし、VoigtArea ピーク形式を選択します。

このピーク形式は、ガウス分布型とローレンツ分布型のピーク形状の畳み込みであり、両者の幅のパラメーターが係数のリストに含まれています。



## 9. Do Fit をもう一度クリックします。

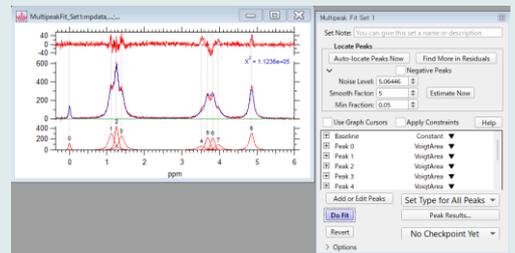
VoigtArea のピーク関数の計算が複雑になったため、収束するまでに少し時間がかかるようになりました。

単一ピークである Peak 0 と Peak 8 は良くなりましたが、多重ピークはまだずれています。

これらのピークは、Peak 0 や Peak 8 よりもはるかに大きな幅が設定されているようです。

ここでは、厄介な重なりがあつてうまくフィットしません。

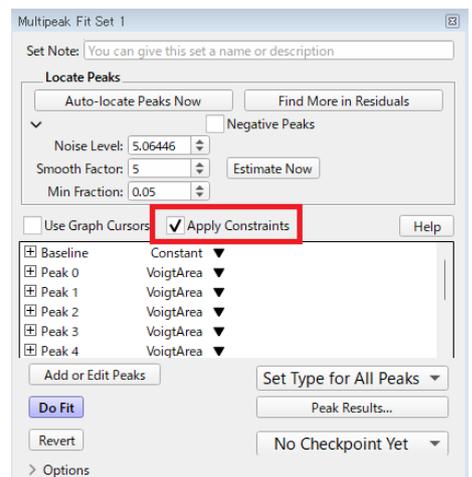
フィッティングを向上させるために、これらの振る舞いを制限する必要があります。



## 10. パネル内の Apply Constraints を有効にします。

まだ、何も変わっていません。

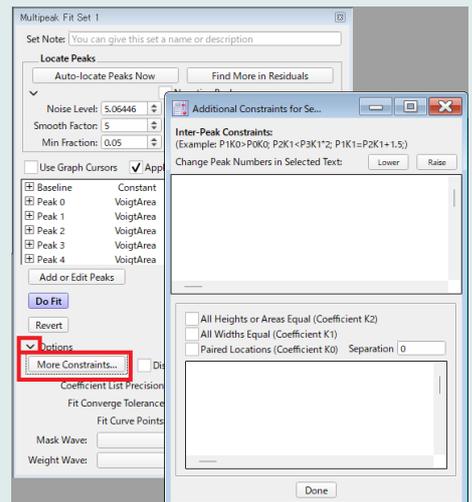
実際には、ここで、いくつかの制約を定義する必要があります。



## 11. パネルの一番下の Options を開き (Options の隣にある小さな矢印をクリック)、More Constraints ボタンを押して、Additional Constraints パネルを表示します。

Additional Constraints for Set 1 ダイアログが開きます。

ここでは、異なるピークの係数を結合する独自の計算式を定義したり、プリセットを使うことができます。



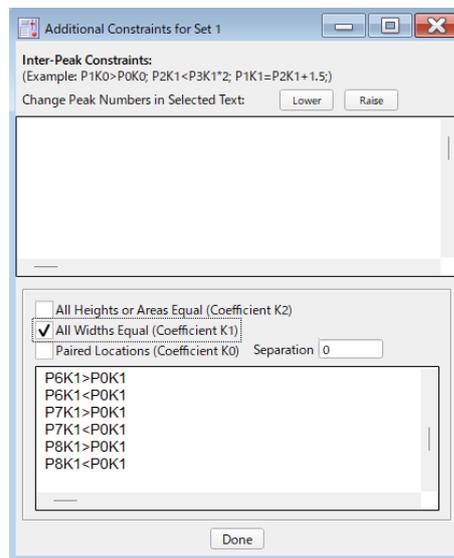
## 12. パネル中央の All Width Equal (Coefficient K1) を有効にします。

これにより、すべてのピークの係数 K1 がリンクされます。  
VoigtArea ピークの場合、これは GaussFWHM 係数となります。  
この制約の表現はパネルの下部に表示されます。

係数の構文は、P[数字]K[数字]、またはベースライン関数の係数については BLK[数字] です。  
数字は 0 から始まるインデックスです。

等式は、 $<$  と  $>$  を使った2つの式で表現されることに注意してください。

これがフィッティングにおける制約の動き方です。



## 13. Done ボタンをクリックしてパネルを閉じます。

## 14. Do Fit ボタンをクリックします。

いくつかのピークが外れて、マイナスになることがあります。  
これは、ピークがすでに広くなりすぎていて、重なりが激しい場合に起こる可能性があります。

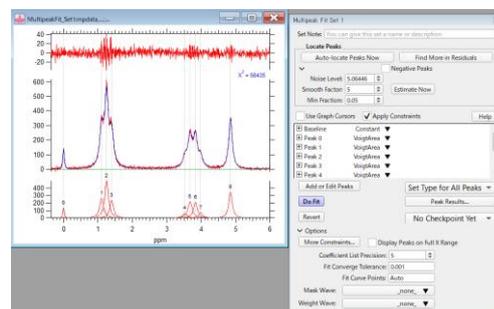
このような問題を修正するには、ステップ8を繰り返して、すべてのピークの幅を自動検出された値にリセットし、もう一度 Do Fit をクリックします。

かなりフィットするようになりました。

しかし、前の手順で GaussFWHM 値 (K1 を思い出してください) のみを一緒にリンクしました。

ローレンツ幅は依然として制約されていません。

このデータの測定では、ガウス分布とローレンツ分布の両方について、同じセット内の各ピークの幅が同じである必要があると仮定します。



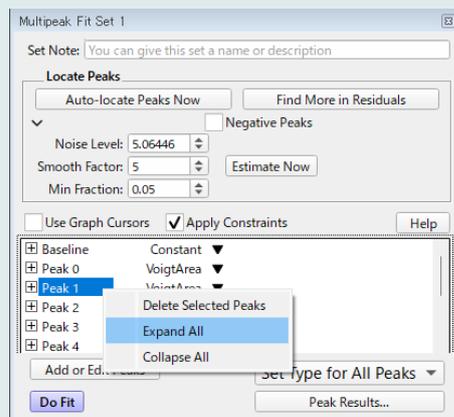
## 15. Peak の行 (どの行でもよい) の上で右クリックして、Expand All を選択して、すべてのピークの係数を調べます。

係数の詳細を確認するには、パネルを少し大きくする必要がありますが、もしもありません。

LorentzFWHM の値は依然として多少異なることがわかります。

これを修正するには、Peak 1, 2, 3 と Peak 4, 5, 6, 7 の間の LorentzFWHM (係数 K3) をリンクする必要があります。

それではやってみます。



## 16. More Constraints ボタンをクリックして、もう一度 Additional Constraints パネルを表示します。

## 17. パネル上部のフリーフォームに、以下の式を記入（またはコピー）してください。

P1K3=P2K3

P2K3=P3K3

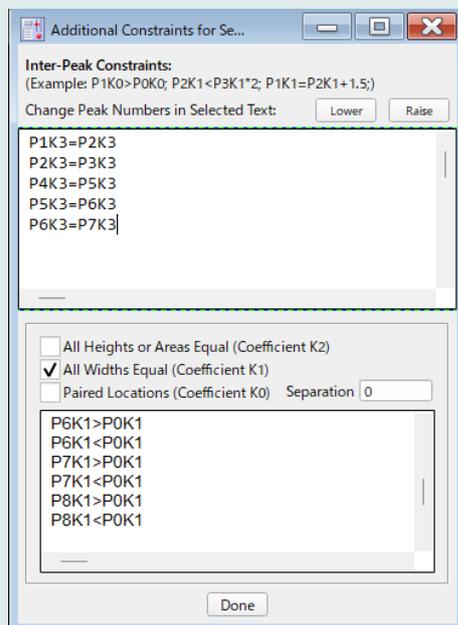
P4K3=P5K3

P5K3=P6K3

P6K3=P7K3

パネルが正しい表現に変換するので、ここでは等号を記述できません。

Enter キーを押すか、または Done ボタンを押す前に、これらの表現がフィット処理によって、必要に応じて自動的に < と > のペアに変換されることが確認できます。



## 18. Done ボタンを押して、パネルを閉じます。

## 19. Do Fit ボタンをクリックします。

係数リストでは、Peak 1, 2, 3 の LorentzFWHM と、Peak 4, 5, 6, 7 の LorentzFWHM が等しくなっていることがわかります。

最後の桁まで正確に一致しないかもしれませんが、これは四捨五入が関係しているため、気にする必要はありません。

算術制約は非常に強力で、ピーク距離、面積や高さの比率、指数関数的な依存関係など、さまざまなデータの観点から定義できます。

もちろん、制限はあります。制限については、ヘルプの Curvefitting の Constraints Expressions を参照してください。

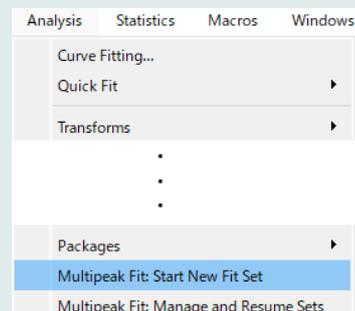
## 例 5 : 複雑なバックグラウンドを使う

新しいデータを使って始めます。

メニュー Analysis → Packages → Multipeak Fitting を選択し、Analysis メニューに Multipeak Fit の項目があるところからです。

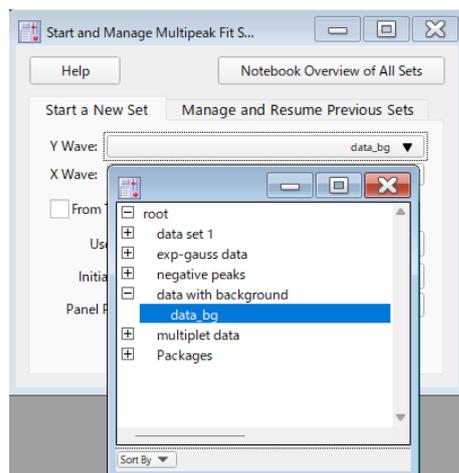
### 1. メニュー Analysis → Multipeak Fit: Start New Fit Set を選択します。

Start and Manage Multipeak Fit コントロールパネルが表示されます。



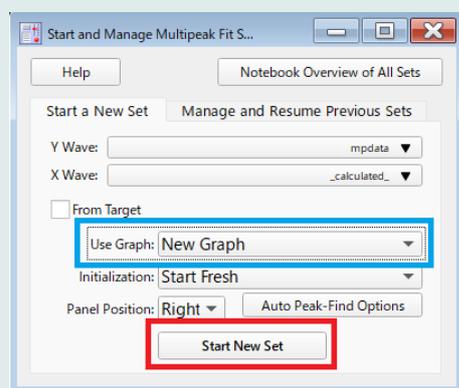
### 2. Y Wave ポップアップメニューで、「data with background」データフォルダーから「data\_bg」を選択します。

X Wave ポップアップメニューで、「\_calculated\_」を選択します。



### 3. Use Graph で、New Graph が選択されていることを確認してください。

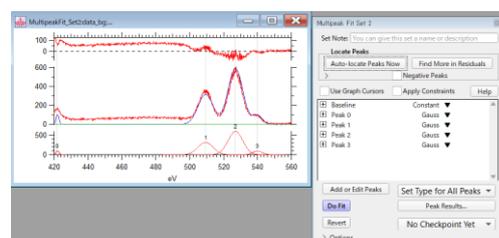
Start New Set ボタンをクリックします。



### 4. Auto-locate Peaks Now ボタンをクリックします。

この (サンプルの) データセットには、いくつかのピークが含まれていますが、目立つバックグラウンドも存在します。

このようなバックグラウンドは、物理モデルに従うことが多く、適切なバックグラウンド機能を選択すると、より良い (より正確な) 結果が得られます。



ちなみに、バックグラウンド機能として Cubic を選択すると、ここでは「良い」フィット感を得られますが、これはここで望んでいることではありません。

Auto-locate 機能により4つのピークが検出されましたが、最も左のピークはしっぽのような形に見えます。  
これは、今のところ無視することができます。

## 5. ピークリスト内の Baseline のプルダウンメニューから PassiveShirley を選択します。

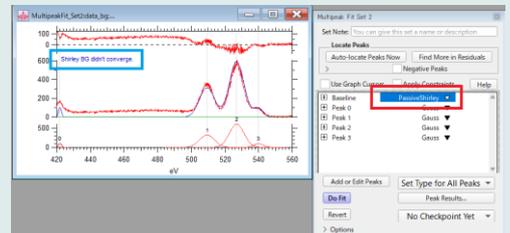
Shirley バックグラウンドは、非常にシンプルで便利なモデルであるため、よく使われます。

実行してみると、バックグラウンドがゼロであり、'Shirley BG didn't converge (Shirley BG が収束しません)' という警告メッセージが出ます。

このバックグラウンドは反復的に計算され、現在のフィッティングの範囲の開始値と終了値をつなごうとします。

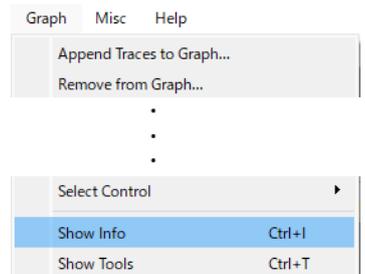
現在のフィッティング範囲は、現時点ではスペクトル全体です。左端の値はもともとあったしっぽの分で、かなり高い値であるため、これは機能しません（このバックグラウンドは、ピークとそのしっぽの間のギャップを埋めることができません）。

このバックグラウンド形式で使うことができる終点にフィッティング範囲を限定する必要があります。

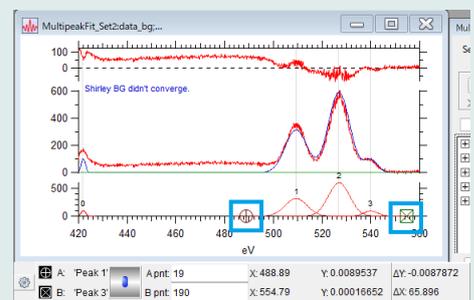


## 6. Graph メニューから、Show Info を選択します。

グラフの下にカーソルバーが表示されます。



## 7. カーソル A をデータトレースの X 値が約 490 の地点に、カーソル B を約 555 の地点に設定し、3つのピークを囲み、高い点と低い点の「平らな」点にカーソルが位置するようにします。



## 8. パネルの Use Graph Cursors チェックボックスを有効にすると、フィッティング範囲がカーソルで囲まれた範囲に限定されます。

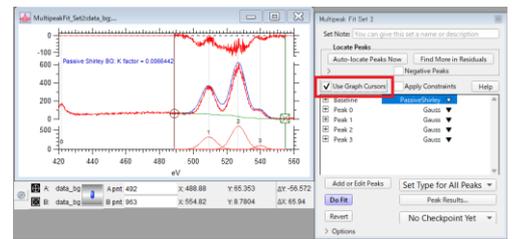
かなり良くなりました。Shirley バックグラウンドはこの範囲で計算できます。

PassiveShirley バックグラウンドのパラメーターリストを開くと、No Effect という名前のパラメーターが1つだけあり、常にゼロであることに注意してください。つまり、フィッティングパラメーターは存在せず、バックグラウンドは常に、選択したフィッティング範囲の2つの終点に接続されています。

実際、カーソルを動かすとバックグラウンドが新しい終点に更新されます。

これが「Passive」の意味です。

ピークに合わせてバックグラウンドをアクティブに調整したい場合は、代わりに ActiveShirley を選択してください。ここにはフィッティングパラメーターがあります。



## 9. Do Fit ボタンをクリックしてください。

メッセージボックスが表示されます。

何が起こったのでしょうか？

カーソルでフィッティング範囲を限定したため、Peak 0 がこの範囲の外にあることを忘れていました。

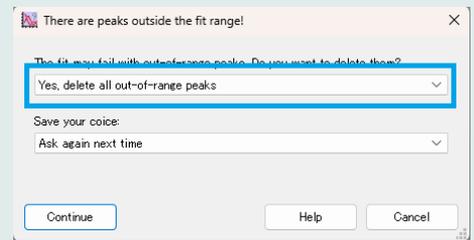
これは、いわば「宙に浮いている」状態です。

このようなピークは通常、フィッティング範囲の外の実際のデータとの比較がないため、フィッティングを失敗させます。

範囲外のピークは、極端な値に向かってただドリフトする傾向があります。

メッセージボックスは、フィッティングを実行する前にそのようなピークを削除するかを聞いています。

何をすべきかわかっていない場合は、現在選択されている「Yes, delete all out-of-range peaks」が最善である可能性が高いです。



## 10. Continue をクリックします。

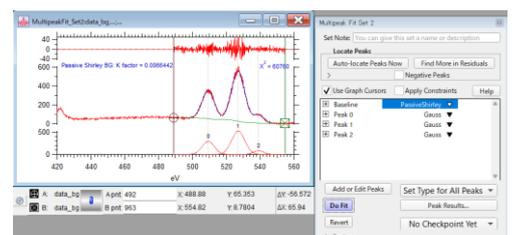
フィッティングはうまくいき、収束します。

この結果は正しいでしょうか？これはご自身で判断していただく必要があります。

フィッティングでは、選択されたバックグラウンドとピーク関数が本当に意味があるかどうかはわかりません。

これにはデータの取得の背景を知っておく必要があります。

むしろ、左端のピーク（もう一方のピークが削除されたため、現在は Peak 0 となっている）は、独自のバックグラウンドステップ



を持たず、他のピークからの一定のバックグラウンドに「乗っている」だけである可能性もあります。

別なモードも試してみます。

## 11. Baseline の行で、ArcTangent を選択します。

このバックグラウンドが、係数の初期値をいくつか埋めます。

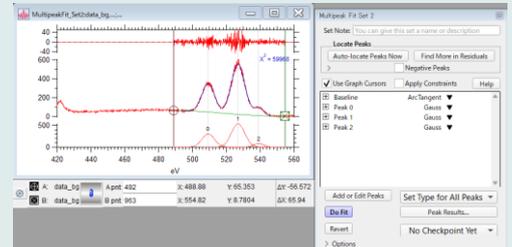
Shirley や ArcTangent のようなバックグラウンド関数は、ゼロから開始したり、残りのパラメーターをコピーするだけのよりシンプルな Linear や Cubit 関数とは異なり、初期推測値が得られません。

ArcTangent には4つの係数があります。

ここで Do Fit ボタンを押すと、バックグラウンドにはいくつかの便利な値が表示されますが、実際には、この関数には多くの値があり、良好なフィッティングが得られる可能性があります。

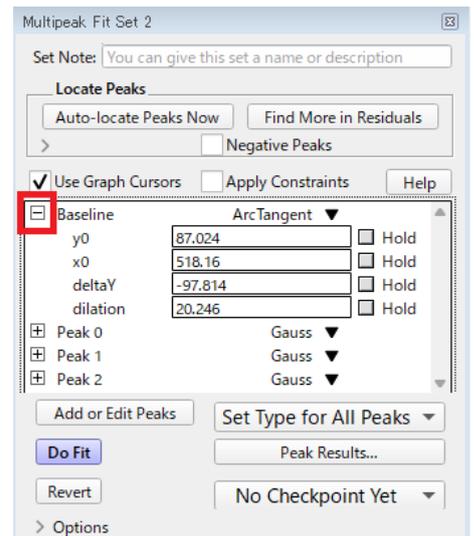
今回、これはあまり役に立ちそうにありません。

少なくとも、私たちが何を求めているのか、ある程度のガイドラインを示す必要があります。



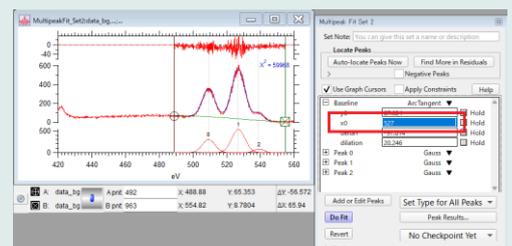
## 12. Baseline の行の左の「+」をクリックします。

Baseline のセクションが開き、係数のセルが表示されます。

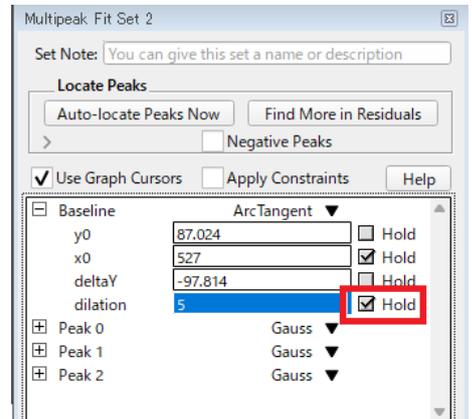


## 13. K1 (ここでは x0 と名付けられている) の値のセルをクリックし、527 を入力して Enter キーを押します。

これにより、バックグラウンドのステップの位置が Peak 1 のすぐ下に固定されます。

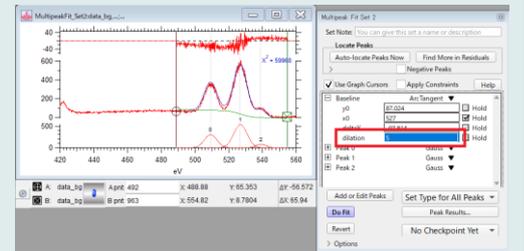


**14. Hold チェックボックスにチェックを入れ、係数の値を固定します。**

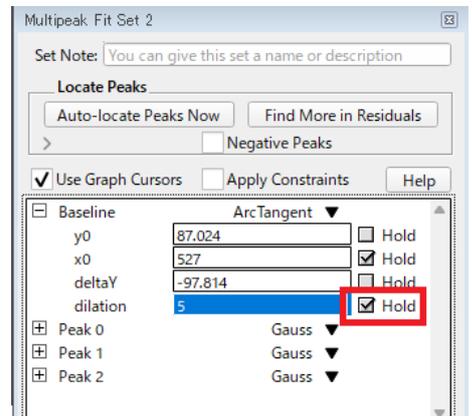


**15. K3 (ここでは dilation と名付けられている) の値のセルをクリックし、5 を入力して Enter キーを押します。**

これにより、ステップの幅が 5 (Peak 1 のおおよその幅) に設定されます。



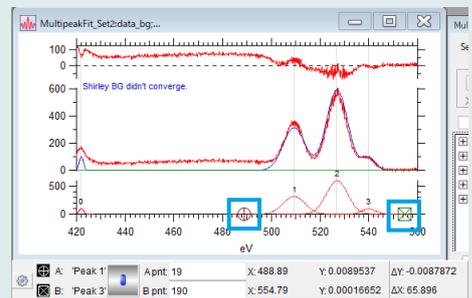
**16. ここでも、Hold チェックボックスにチェックを入れ、係数の値を固定します。**



**17. Do Fit ボタンをクリックします。**

これで、バックグラウンドが Peak 1 の下に上昇します。Peak 0 と Peak 2 のバックグラウンドはほぼ一定です。フィッティングは以前と同じくらい良くなりました。

しかし、今度はいくつかの追加の制約を設定しなければなりませんでした。理論がそれを裏付けるのであれば、これらは正当化されるかもしれませんが。



さて、現実的な話になります。

うまく使いこなすと非常に強力な、もう 1 つのバックグラウンド形式があります。

Tougaard バックグラウンド関数です。

このバックグラウンドは、デフォルトでは読み込まれていないため、まずはそれを Experiment に追加する必要があります。

## 18. Analysis メニューから、Multipeak Fit → Load Addon: Tougaard Back Ground を選択します。

これにより、バックグラウンドのプルダウンメニューに2つの新しい選択肢 (TougaardTwo と TougaardThree) が追加されます。

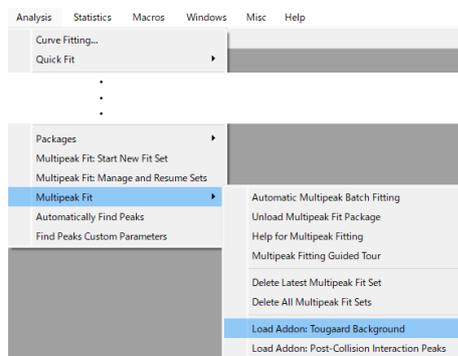
これらについては Multipeak Fit のマニュアルで詳しく説明しています。

簡単に説明すると、これらの機能は物理的な散乱モデルを記述するもので、2つから4つのパラメーターを使って物質の挙動を記述します。

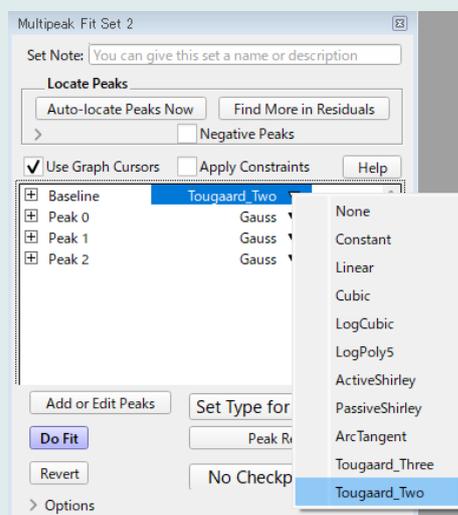
これらのパラメーターは古典的な意味でのフィッティング係数ではなく、バックグラウンドをデータセットに「自由に」フィッティングできません。

その代わりに、材料の正しい値を知っておく必要があります。

係数 K0 (B と呼ばれ、全体的な高さをコントロールする) のみを自由にフィッティングすべきです。



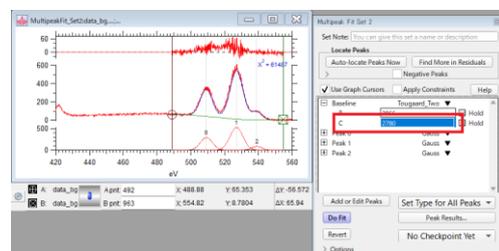
## 19. Baseline の行で、Tougaard\_Two を選択します。



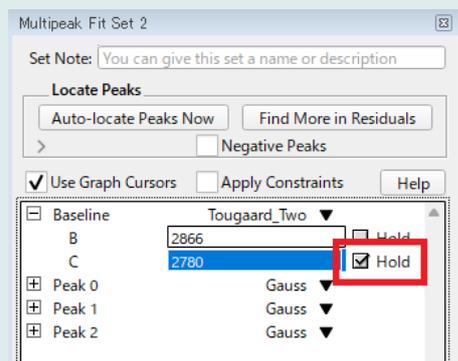
## 20. Baseline の係数を開き、K1 (C という名前の項) をクリックします。

2780 を入力し、Enter キーを押します。

これが「材料」の正しい値だと仮定しましょう (その材料は存在しません。あくまでも架空のデータです)。



## 21. Hold チェックボックスにチェックを入れ、係数の値を固定します。



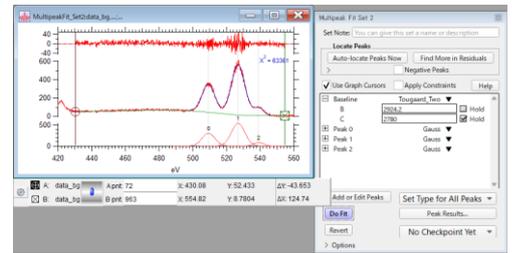
## 22. Do Fit ボタンをクリックします。

フィッティングは、バックグラウンドのための係数 B を調整しました。

このバックグラウンドはかなり複雑なため、B の収束すら保証されていません。

最良のケースは、材料のすべての係数値を把握していて、それらを適切に設定できる場合です。

これだけではあまり改善したように思えませんが、カーソルを移動させるとどうなるか見てみます。

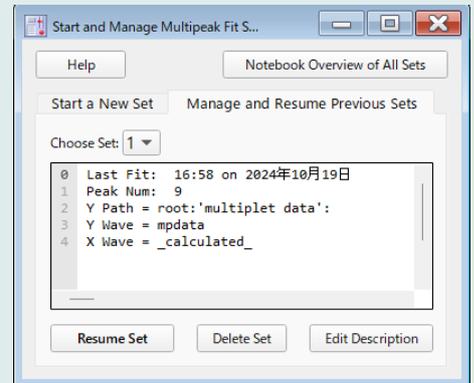


## 23. カーソル A を 430 に移動し、Do Fit をもう一度クリックします。

Tougaard バックグラウンド関数は、ピークから離れた場所でもバックグラウンドを正しく描写できることがわかります。

これは、Shirley 関数でも ArcTangent 関数でも不可能でした。

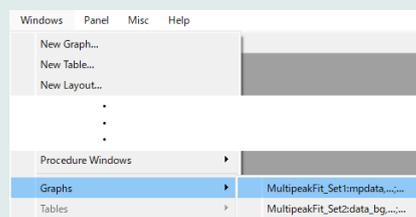
Tougaard バックグラウンド関数を使うのに適切なデータと意味のある値があれば、バックグラウンドを物理的に正しい方法で描写できる可能性（保証はできない）があります。



## 以前のデータセットに戻る

### 1. メニュー Windows → Graphs → MultipeakFit\_Set1 を選択します。

これにより、例 1 のグラフ、または最初に開始した例が表示されます。

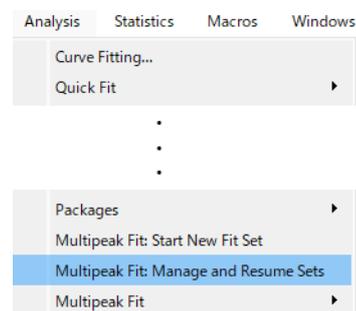


### 2. Multipeak Fit コントロールパネル、または Multipeak Fit グラフを閉じるウィンドウのボックスをクリックします。

マルチピークフィットを完了して、これで終了、と思ったときにこの操作をしたかもしれません。

### 3. メニュー Analysis → Multipeak Fit: Manage and Resume Sets を選択します。

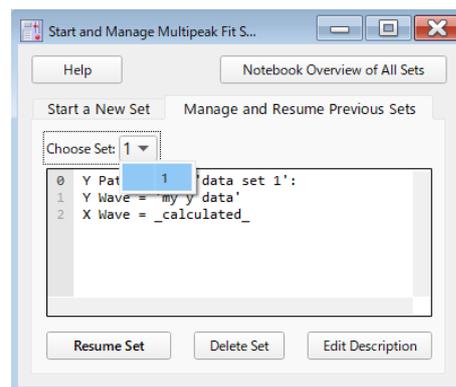
Start and Manage Multipeak Fit コントロールパネルが表示されます。



### 4. パネルの Choose Set で 1 を選択します。

このセットで使われる X と Y のウェーブは、チェックボックスの下のノートに表示されるはずですが。

表示されない場合、おそらくこの Multipeak Fit セットを閉じた後にデータを別のフォルダーに移動したり、名前を変更した可能性があります。



### 5. Resume Set ボタンをクリックします。

すべてを閉じる前の状態になるようにフィッティングセットが再構築されます。

## セットを再開するもう一つの方法

再開したい Multipeak Fit セットで使ったグラフを完全に閉じてしまった場合、このセクションの方法は機能しません。

Experiment 内にグラフを開いたままにしておく必要があります。

### 1. メニュー Windows → Graphs → MultipeakFit\_set1 を選択します。

これにより、例 1 のグラフが前面に移動します。

### 2. Multipeak Fit コントロールパネルのクローズボックスをクリックして、パネルを閉じます。

マルチピークフィットを完了して、これで終了、と思ったときにこの操作をしたかもしれません。

しかし、今になって分析を再度行う必要があることに気が付きました。

### 3. メニュー Analysis → Multipeak Fit: Start New Fit Set を選択します。

Start and Manage Multipeak Fit コントロールパネルが再び表示されます。

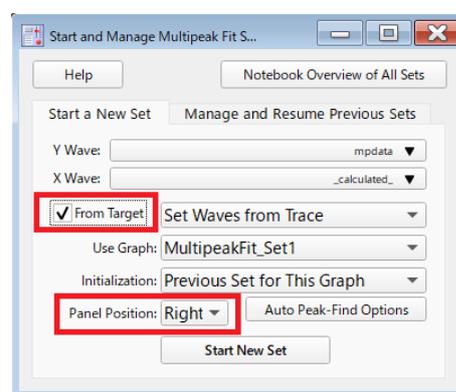
### 4. Panel Position でパネルがグラフウィンドウのどこに表示されるかを指定します。

From Target チェックボックスをオンにします。

Y Wave と X Wave のメニューには、現在、前面のグラフに表示されているウェーブのみが表示されます。

グラフが調べられ、Y Wave と X Wave のメニューが、グラフで最初に発見されたトレースに表されるウェーブに設定されます。

Use Graph メニューは最前面のグラフウィンドウに設定され、Initialization は、Previous Set for This Graph に設定されています。

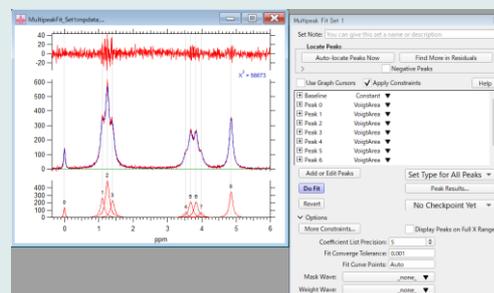


### 5. Start New Set ボタンをクリックします。

グラフは以前に Multipeak Fit セッションに関連付けられていたため、そのセッションのセット番号でマークされています。

これにより、Multipeak Fit がそのグラフに関連するセッションのデータを見つけ、Set 1 用の Multipeak Fit コントロールパネルが再構築されます。

また、コントロールパネルをグラフのどちら側に接続するかを変更する方法も提供します。



コントロールパネルを閉じ、Start Multipeak Fit コントロールパネルでグラフの異なる側を選択してセッションを再起動するだけです。

以上で、Multipeak Fit のガイドツアーは終了です。

ヘルプファイルには、コントロールパネルの操作に関する詳細な説明が記載されており、Igor プログラマー向けの情報も含まれています。