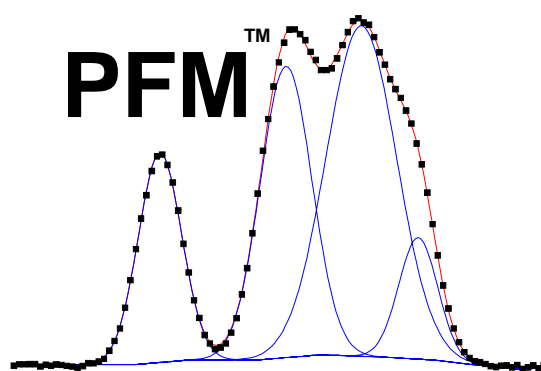

Peak Fitting Module



OriginLab Corporation

Copyright © 2003 by OriginLab Corporation

All rights reserved. 본 문서의 일부라도 OriginLab Corporation 의 서면에 의한 사전 승인 없이는
재생되거나 전송될 수 없습니다.

OriginLab, Origin, 및 LabTalk 는 OriginLab Corporation 의 등록 상표 또는 상표입니다. 본
문서에서 언급된 상품 및 회사명은 각 소유 회사의 상표일 수 있습니다.



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



OriginLab 한국 총판
렉스소프트(주)
서울 용산구 한강로 3 가 40-
17 번지 금영 빌딩 4 층
Tel : 02-749-7400
Fax : 02-749-7403
E-mail : sales@rexsoft.co.kr
Tech support : tech@rexsoft.co.kr
Web : www.rexsoft.co.kr

목차

PFM 설치 및 시작하기	7
PFM 설치.....	7
PFM 제거.....	8
피크 피팅 세션 들어가기.....	9
마법사를 사용하여 시작하기.....	10
Peak Fitting Wizard 자습서	11
소 개	11
자습서 1, Peak Fitting Wizard 소개.....	12
시작하기	12
데이터 범위 선택	13
기저선 정의	14
피크 찾기	15
피크 매개변수 조정	18
피팅 수행	20
피팅 결과 보고	22
피크 피팅 세션 종료	24
자습서 2, 숨겨진 피크의 데이터 분석	24
시작하기	24
데이터 범위 선택	25
기저선 정의	25
피크 찾기	28
매개변수 하한 설정	31
피팅 수행	32
피팅 결과 보고	33
피크 피팅 세션 종료	33
자습서 3, 사용자 정의 마법사 만들기	34
시작하기	34
작업을 수행하고 페이지를 숨기며 마법사 훑어보기	35
사용자 정의 절차 파일 저장	37
사용자 정의 마법사 실행	38
Peak Fitting 마법사 참조	40

소 개.....	40
Peak Fitting 마법사 초기화	43
피크 데이터 선택.....	44
데이터 시작 매개변수 설정.....	46
기저선 초기화.....	50
기저선 점을 사용해서 기저선을 만드는 방법 정의	52
기저선 점 수정	52
함수와 기저선 점 피팅.....	53
선으로 기저선 점 연결.....	53
스플라인으로 기저선 점 연결.....	54
기저선 조건 설정.....	54
Y 축을 따라 기저선 조정.....	54
피크 데이터에서 기저선 빼기.....	55
피크 함수 지정과 피크 찾기	55
피크 함수 선택	56
새 함수 수정 및 정의.....	58
피크 자동 찾기	62
데이터 파일에서 피크 정의.....	62
피크 추가, 수정 및 삭제.....	63
마법사 그래프에서 관심 부분 확대.....	63
숨겨진 피크 찾기	64
새 피크 마커 추가	64
피크 마커의 X 위치 수정.....	65
피크 마커 삭제	65
피크별 함수 및 초기 매개변수 할당.....	65
활성 피크 선택	66
피크에 피팅할 함수 변경.....	67
초기 매개변수 값 최적화.....	67
피크 편집 뷰 박스를 편집하는 동안 마법사 그래프 업데이트.....	69
매개변수 고정 및 공유와 제한 설정.....	69
매개변수 값 고정 또는 변화 허용.....	70
피크 사이의 매개변수 공유.....	71
매개변수에 제한 설정.....	71
피팅 절차 제어 및 피팅 수행.....	72
반복 횟수 설정	73
허용 범위 설정	73
신뢰 수준 및 예측 밴드 수준 설정.....	74
기저선 변화 또는 고정.....	74
데이터 가중 처리	74
피팅 시작하기	75
잔류 값 검토를 통한 피팅 확인.....	75
결과 보고.....	77
피팅 함수 매개변수 및 피팅 통계 보고.....	77

워크시트 보고서에서 피크 특성 보고.....	80
그래프 보고서에서 피크 특성 보고.....	84
피크 특성에 대한 대화형 계산 및 보기.....	88
피크 위치를 ASCII 파일에 저장.....	90
초기화 파일에 설정 저장.....	90
사용자 정의 마법사 만들기.....	91

피크 및 기저선 함수 참조 **94**


소 개	94
피크 함수.....	95
Gaussian.....	95
Gauss2	95
EMGauss	95
Lorentz.....	96
Voigt.....	96
PsVoigt1	97
PsVoigt2	97
Pearson7.....	98
Asym2Sig	98
Weibull3	98
LogNormal.....	99
GCAS.....	99
ECS.....	100
CCE	100
BiGauss.....	101
InvsPoly	101
Sine	101
SineSqr.....	102
SineDamp	102
Power2	102
Pulse	102
주기 피크 함수.....	103
SineDamp	103
Sine	103
SineSqr.....	103
기저선 함수.....	104
Line	104
Parabola	104
Cubic.....	104
Poly4.....	104
Poly5.....	105
ExpDec1	105
ExpDec2	105
ExpGrow1.....	105
ExpGrow2.....	105
Hyperbl.....	105

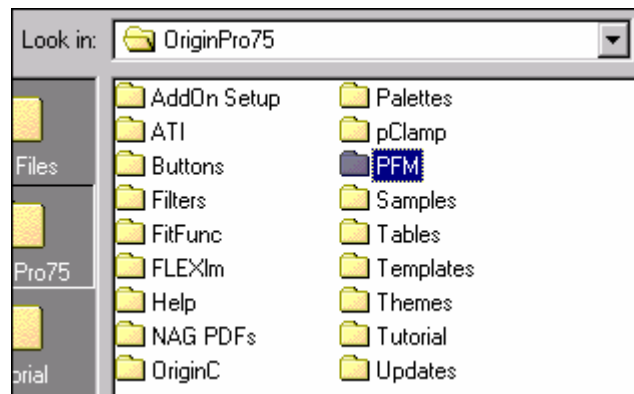
외부 DLL 함수	106
LabTalk 를 이용한 PFM 프로그래밍	108
소 개	108
기본 PFM 스크립트: 시작하기	108
결과 가져오기	111
PFM 제어	116
함수가 다른 피크	117
데이터 집합의 일부 피팅	118
제한	119
부가 메소드 및 속성	121
여러 데이터 집합의 동시 피팅	126
색인	128

PFM 설치 및 시작하기

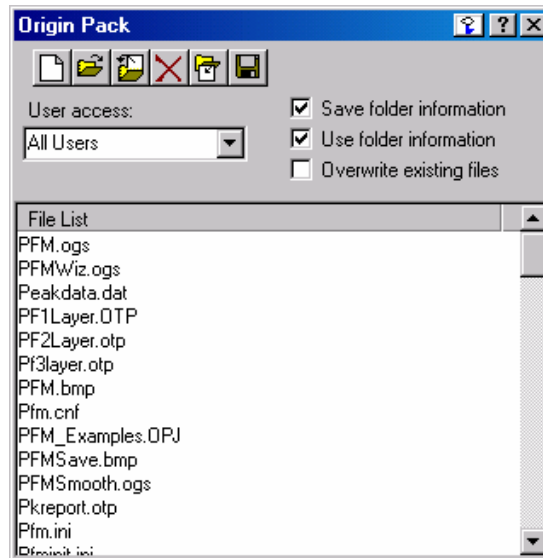
PFM 설치

PFM 을 설치하려면 다음을 수행하십시오.


- 1) Origin 7.5 를 시작합니다.
- 2) **Tools:Pack/Unpack OPK Files** 를 선택합니다. 그러면 Origin Pack 대화 상자가 열립니다.
- 3) **Open** 버튼  을 클릭합니다.
- 4) Origin Pack Files 대화 상자에서 Oringin(Pro) 프로그램 폴더의 **PFM** 하위 폴더를 검색합니다.



- 5) PFM.OPK 를 선택하고 **Open** 을 클릭합니다(다음 페이지에 계속).



6) Origin Pack 대화 상자에서 **Extract** 버튼  을 클릭하여 파일을 설치합니다.

그리고, Origin 워크 스페이스에 PFM 툴바가 표시됩니다. 이 툴바에는 **Enter Peak Fitting Session** 버튼  하나가 있습니다.

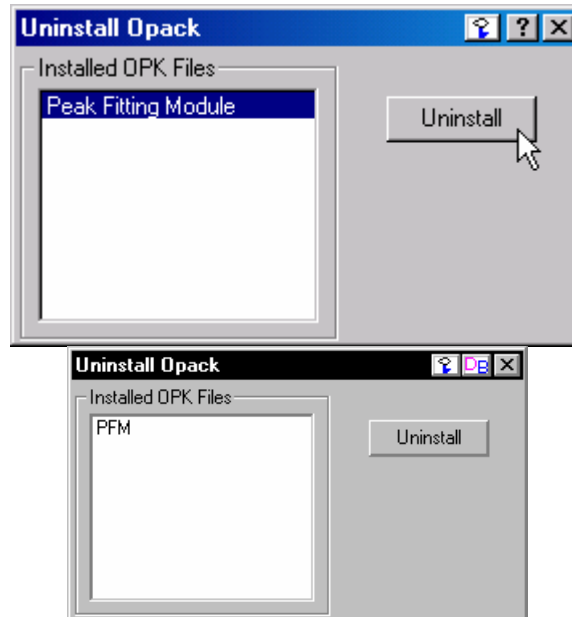
PFM 제거

PFM 을 제거하려면 다음 작업을 수행하십시오.

1) Origin 을 시작합니다. Origin 이 이미 열려 있고 현재 Origin 세션에서 **Peak Fitting Wizard** 를 실행한 경우에는 Origin 을 닫았다가 다시 시작합니다. Origin 이 열려 있고 현재 세션에서 마법사를 실행하지 않은 경우에는 다음 단계로 갑니다.

2) **Tools:Uninstall OPK Files** 를 선택합니다. 그러면 Uninstall Opack 대화 상자가 열립니다.


PFM 제거



3) 리스트 박스에서 **Peak Fitting Module** 을 선택하고 **Uninstall** 을 클릭합니다.

피크 피팅 세션 들어가기

워크시트나 그래프가 활성 상태이면 피크 피팅 세션에 들어갈 수 있습니다. 피크 피팅 세션에 들어가려면 **PFM** 툴바에서 **Enter Peak**



Fitting Session 버튼  을 클릭합니다. 이 버튼은 마법사 그래프에 활성 데이터 집합이 표시된 **Peak Fitting Wizard** 를 엽니다.

중요 주의: **Peak Fitting** 마법사가 열려 있는 경우에 **Origin** 에서 작업을 활성화하여 시작하면 안 됩니다. **Origin** 으로 돌아가 작업을 수행해야 하는 경우에는 먼저 **Peak Fitting Wizard** 를 닫아야 합니다.

마법사를 사용하여 시작하기

Peak Fitting Wizard 안의 여러 곳을 이동하려면 **Next**(와 **Back**) 버튼을 클릭하거나 마법사의 왼쪽에 있는 마법사 맵에서 페이지 아이콘을 클릭합니다. 마법사 맵에 있는 페이지 아이콘은 활성 페이지(녹색), 방문하지 않은 페이지(노란색), 이미 방문하거나 건너뛴 페이지(갈색), 마지막 마법사 페이지(빨간색)를 나타내도록 색상 코드 처리가 됩니다.

마법사 맵을 사용하면 앞뒤 페이지로 모두 건너 뛸 수 있기 때문에, 마법사 맵에는 **Next** 와 **Back** 버튼 외에도 여러 이동 옵션이 있습니다. 하지만 **Peak Fitting Wizard** 를 처음 사용하시는 경우에는, 제시되는 순서에 따라 마법사 페이지 사이를 이동해야 합니다. 마법사에 익숙해지고 나면 페이지를 건너 뛰거나 숨길 수 있습니다. 마법사 페이지를 건너 뛰거나 숨기는 것에 대한 자세한 내용은 "자습서 3, 사용자 정의 마법사 만들기"를 참조하십시오.

마법사 페이지에서 옵션을 선택한 후 작업을 수행하면, 마법사 그래프(마법사의 오른쪽에 있는)가 업데이트됩니다. 마법사 디스플레이를 최대화  하면 마법사 그래프 보기를 확장할 수 있습니다. 마법사 맵을 숨긴 후 마법사를 최대화하면 마법사 그래프를 더 확장할 수 있습니다. 마법사 맵을 숨기려면 마법사의 빈 영역(예를 들어 **Back** 버튼 옆)을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 후 단축 메뉴에서 **Show Wizard Map** 을 선택합니다. 그러면 메뉴 명령 선택을 취소하고 마법사 맵을 숨길 수 있습니다. 이제 마법사를 최대화  하여 마법사 그래프 보기를 확장합니다.

Peak Fitting Wizard

자습서

소 개

Peak Fitting Wizard 를 사용하여 시작하는 것을 돕기 위해 세 개의 자습서 강의가 제공됩니다.

"자습서 1, Peak Fitting Wizard 소개"는 이 페이지에서 볼 수 있습니다. 이 자습서에서는 Peak Fitting Wizard 의 페이지와 컨트롤을 소개합니다. 여기에서는 샘플 데이터 집합을 사용해서 마법사의 각 페이지를 살펴보고자 합니다.





"자습서 2, 숨겨진 피크의 데이터 분석"는 24 페이지에서 볼 수 있습니다. 이 자습서에서는 Peak Fitting Wizard 의 기저선 점 및 피크 찾기 알고리즘을 소개합니다. 여기서는 이차 미분을 검토하는 방법을 익힙니다. 매개변수에 하한 값을 설정하는 방법도 익힙니다.

"마법사 맵을 사용하면 앞뒤 페이지로 모두 건너 뛸 수 있기 때문에, 마법사 맵에는 Next 와 Back 버튼 외에도 여러 이동 옵션이 있습니다. 하지만 Peak Fitting Wizard 를 처음 사용하시는 경우에는, 제시되는 순서에 따라 마법사 페이지 사이를 이동해야 합니다. 마법사에 익숙해지고 나면 페이지를 건너 뛰거나 숨길 수 있습니다. 마법사 페이지를 건너 뛰거나 숨기는 것에 대한 자세한 내용은 "자습서 3, 사용자 정의 마법사 만들기"를 참조하십시오. "는 10 페이지에서 볼 수 있습니다. 이 자습서에서는 사용자 정의 마법사를 만드는 프로세스를 설명합니다. 여기서는 Peak Fitting Wizard 의 페이지를 숨기는 방법을 익힙니다. 숨겨진 페이지 중 일부는 사용자 정의 작업을 수행하도록 미리 설정됩니다. 다른 페이지들은 작업을 수행하지 않도록 설정됩니다. 또한, 사용자 정의 마법사를 실행시키는 사용자 정의 툴바 버튼을 만드는 방법도 살펴보고자 합니다.

자습서 1, Peak Fitting Wizard 소개

이 자습서에서는 Peak Fitting Wizard의 페이지와 컨트롤을 소개합니다. 여기에서는 PFM에서 제공하는 샘플 데이터를 사용하여 기저선을 정의하고, 피크의 자동 찾기와 수동 추가 작업을 수행하고, 대화식 디스플레이를 사용하여 초기 피크 매개변수 값을 조정하고, 데이터를 피팅하는 것은 물론, 피크 분석 보고서를 사용자 정의하는 방법도 살펴보려고 합니다.

시작하기

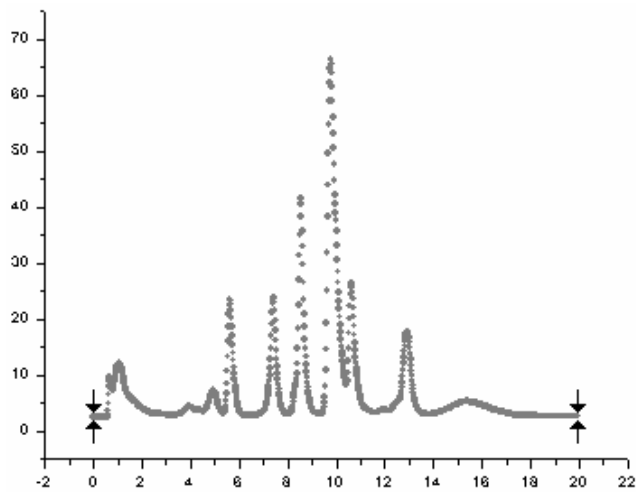
- 1) Origin을 시작한 후 Standard 툴바에서 Open 버튼 을 클릭합니다.
- 2) Origin 폴더에 있는 사용 가능한 파일의 목록에서 PFM_Examples.OPJ를 선택한 후 Open 버튼을 클릭합니다. 워크스페이스에 메모장 창이 활성화된 프로젝트가 열립니다.
- 3) 프로젝트 탐색기가 현재 열려 있지 않은 경우에는 Standard 툴바에서 Project Explorer 버튼 을 클릭하여 엽니다.
- 4) 프로젝트 탐색기에서 Chromatography Data 폴더를 더블 클릭합니다.
- 5) 그래프의 제목 바를 클릭하거나 프로젝트 탐색기 오른쪽의 Graph3 아이콘을 더블 클릭하여 Graph3 - GPC Single Channel Chromatogram 창을 활성화합니다.
- 6) PFM 툴바의 Enter Peak Fitting Session 버튼 을 클릭합니다. Graph3 데이터가 표시된 Peak Fitting Wizard가 열립니다.
마법사의 왼쪽에 있는 마법사 맵에는 마법사를 통해 이동할 수 있게 해 주는 버튼이 제공됩니다(Next 및 Back 버튼과는 별도로). 하지만 마법사 맵을 숨기면, 마법사의 오른쪽에 있는 마법사 그래프를 확장해서 볼 수 있습니다.
- 7) 마법사의 Help 버튼 옆에 있는 회색의 빈 영역을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭합니다. 그러면 단축 메뉴가 열립니다.
- 8) 단축 메뉴에서 Show Wizard Map을 선택합니다. 그러면 메뉴 선택을 취소하여 마법사 맵을 숨길 수 있습니다.
- 9) 화면에서 마법사 디스플레이를 최대화하려면 마법사에서 Maximize 버튼 을 클릭합니다.

데이터 범위 선택

Peak Fitting Wizard 를 처음 열면 **Choose Data** 페이지가 활성화됩니다. 이 페이지에서 다른 피크 데이터 집합을 선택하거나 현재 선택된 데이터 집합의 범위를 편집할 수 있습니다.

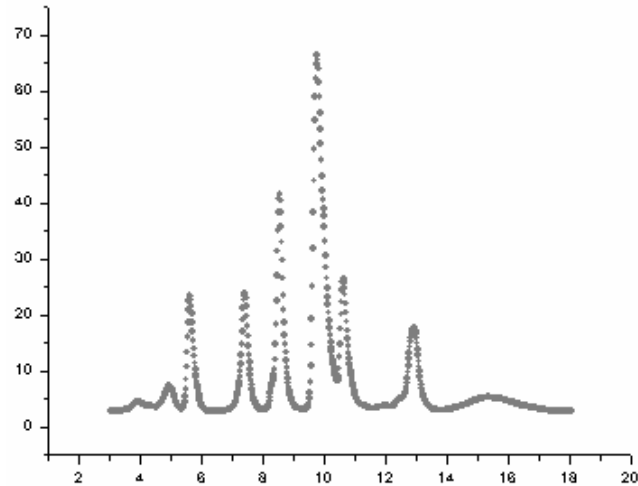
1) **Select Range** 버튼을 클릭합니다. 마법사 그래프의 피크 데이터 양쪽 끝에는 데이터 마커가 표시됩니다. 또, 마법사 페이지에는 활성화된 데이터 마커의 현재 X 및 Y 값을 나타내는 **Current Marker Position** 그룹이 표시됩니다.

데이터 범위 선택



- 2) 왼쪽 데이터 마커를 약 $X = 3$ 정도로 끌어 갑니다.
- 3) 오른쪽 데이터 마커를 약 $X = 18$ 정도로 끌어 갑니다.
- 4) **ENTER** 를 눌러 마커를 고정하고 범위 선택 모드를 나갑니다. 그래프는 선택한 범위가 표시되도록 업데이트됩니다. **From** 및 **To** 텍스트 박스도 해당 X 값이 표시되도록 업데이트됩니다.

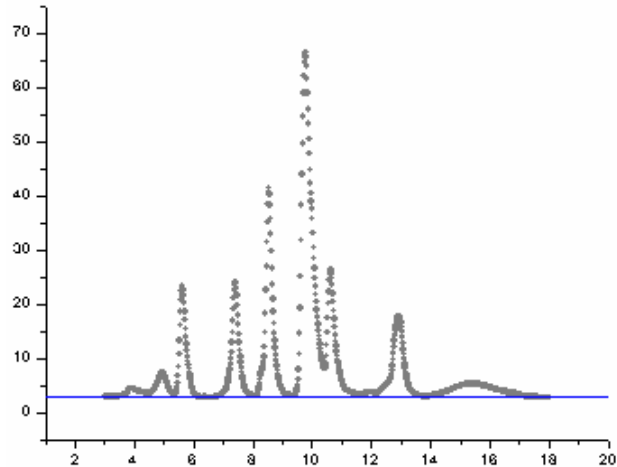
범위 선택 완료



기저선 정의

- 1) Next 버튼을 클릭하여 **Precondition Data** 마법사 페이지로 이동합니다. 이 페이지를 사용하면 시작 매개변수를 설정하여 데이터에 스무딩 필터를 적용할 수 있습니다.
- 2) Next 버튼을 클릭하여 **Baseline Points** 페이지로 이동합니다. 이 페이지에는 기저선 점 선택(또는 피팅 중에 기저선이 바뀌는 것을 허용하는 경우 초기화)에 사용되는 컨트롤이 있습니다. 상수 또는 참조 데이터 집합을 선택하거나, 기저선 점을 그래프 상에서 정의하거나, **Peak Fitting Wizard**의 기저선 찾기 알고리즘을 사용할 수 있습니다. 기본 상수를 선택하면, 이 데이터에 적절한 기저선이 정의됩니다.

상수 기저선 선택



3) Next 버튼을 클릭하여 **Baseline Conditioning** 페이지로 이동합니다. 이 페이지에는 Y 축을 따라 기저선을 조정하거나 피크 데이터에서 기저선을 뺄 때 사용되는 컨트롤이 있습니다.

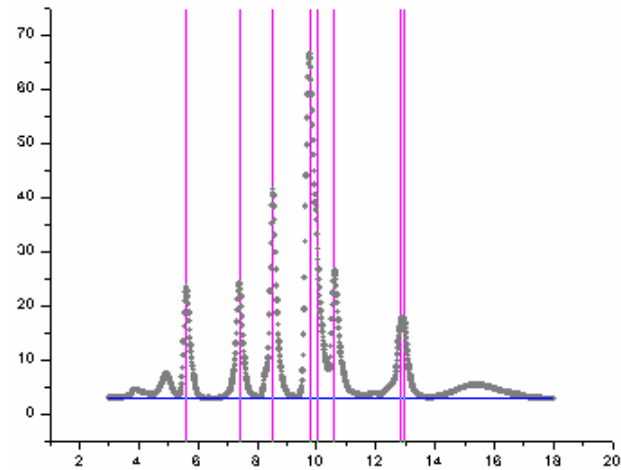
4) Next 버튼을 클릭하여 **Peak Finding** 페이지로 이동합니다.

피크 찾기

Peak Finding 페이지에는 피크 함수를 선택하거나 피크 위치를 추정할 때 사용되는 컨트롤이 있습니다.

1) **Find Peaks** 그룹에서 **Threshold Height** 라디오 버튼을 선택한 상태에서 **Pick Peaks** 버튼을 클릭합니다. 마법사 그래프에서 여덟 개의 피크를 찾아 자홍색(magenta)의 수직선으로 표시합니다.


자동 피크 찾기





Pick Peaks 알고리즘에서는 피크 데이터의 스무딩된 이차 미분을 검색하여 잡음 임계값 위의 값을 찾습니다. 관련 조합 박스에서 잡음 임계값을 올리거나 내려서 피크를 증가 또는 감소시킬 수 있습니다. 이 값을 올리면 알고리즘에서 찾는 피크의 수가 줄어듭니다.

이 예에서는 데이터 집합의 처음과 끝에 있는, 현재 표시되지 않은 피크를 표시합니다.

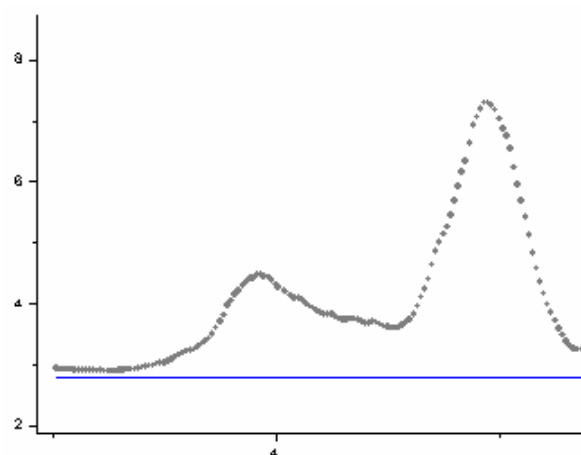
2) **Next** 버튼을 클릭하여 **Define Peaks** 페이지로 이동합니다. 이 페이지에는 마법사 그래프에서 피크를 추가, 수정, 또는 삭제할 때 사용되는 컨트롤이 있습니다.

3) 마법사의 **Enlarger** 버튼  을 클릭하고, 마법사 그래프에서 중간 점이 약 $X = 4$ 와 $X = 5$ 정도에 있는, 표시되지 않은 두 피크를 확대합니다.

주의: 원하는 영역이 확대되지 않으면 마법사의 **Rescale**

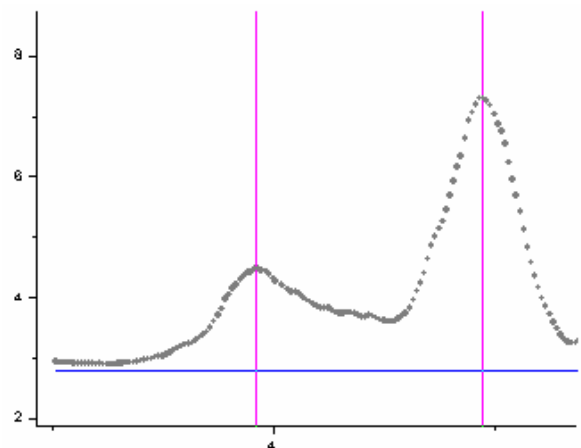
버튼  을 클릭한 후 **Enlarger** 버튼  을 다시 클릭하여 해당 영역을 다시 끌어 갑니다.

마법사 그래프의 일부 확대






4) Add 버튼을 클릭한 후, 두 피크 위치를 더블 클릭하여 정의합니다.

수동 피크 추가

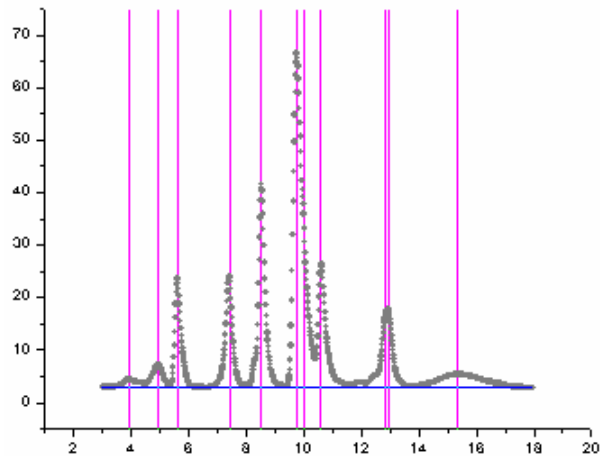


5) Done 버튼을 클릭합니다.

6) 마법사의 Rescale 버튼  을 클릭하여 축을 전체 범위로 재설정합니다.

- 7) 마법사의 **Enlarger** 버튼  을 클릭하고 마법사 그래프에서 중간 점이 약 $X = 15.5$ 정도에 있는 마지막(표시되지 않은) 피크를 확대합니다.
- 8) **Add** 버튼을 클릭한 후 피크 위치를 더블 클릭하여 정의합니다.
- 9) **Done** 버튼을 클릭합니다.
- 10) 마법사의 **Rescale** 버튼  을 클릭하여 축을 전체 범위로 재설정합니다.

나머지 피크 추가



피크 매개변수 조정

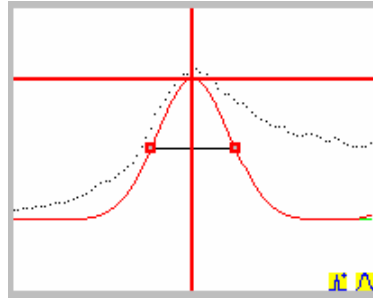
- 1) **Next** 버튼을 클릭하여 **Peak Edit Control** 페이지로 이동합니다.

이 페이지에는 활성 피크와 그 피크에 피팅할 함수를 선택할 때 사용되는 컨트롤이 있습니다. 여기에서는 활성 피크의 피크 매개변수 값을 그래프 상에서 조정할 수 있는 대화식 피크 편집 보기 박스도 제공됩니다.

피크 편집 보기 박스에는 활성 피크 데이터가 분산된 검은 점으로 표시됩니다. 데이터 집합 전체의 이론 곡선은 빨간 선 그림으로 표시됩니다. 활성 피크의 이론 곡선은 녹색 선 그림으로 표시됩니다(복합 이론 곡선에 의해 이 그림이 가려질 수도 있습니다). 두 이론적 커브는 모두 현재 매개변수 값과 선택한 피팅 함수에 따라 결정됩니다. 도표상에서 이론적 커브가 데이터에 겹쳐

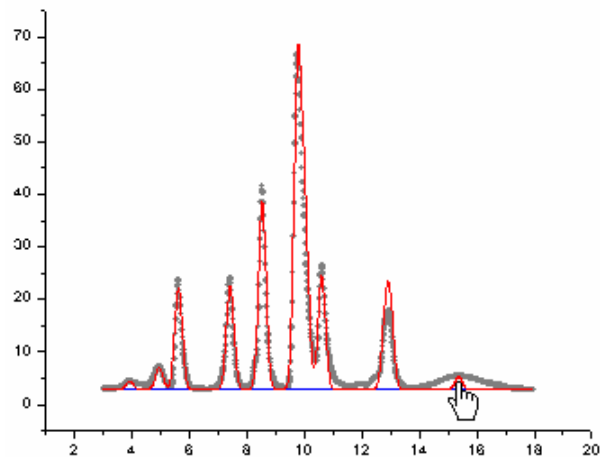
보이는 현상을 개선하기 위해 다음의 세 가지 컨트롤이 제공됩니다.
빨간 피크 중간 선, 빨간 피크 높이 선, 검고 양 끝에 빨간 컨트롤
핸들이 있는 피크 폭 선.

첫 피크가 활성화된 피크 편집 보기 박스



2) 커서를 마법사 그래프의 마지막 피크(중간 점이 약 $X = 15.5$ 정도에 있는) 위로 가져 갑니다. 이 위치에서 마우스 포인터는 손 모양으로 표시됩니다.

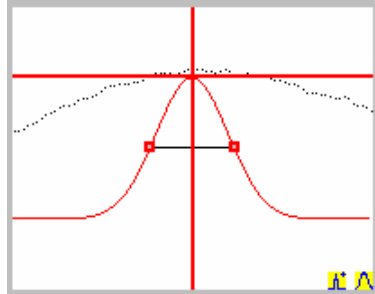
활성 피크 선택




3) 한 번 클릭으로 피크를 활성화합니다.

마법사 왼쪽의 피크 편집 보기 박스가 업데이트되며 현재 선택한 피크와 이론적 커브가 표시됩니다.

마지막 피크가 활성화된 피크 편집 보기 박스

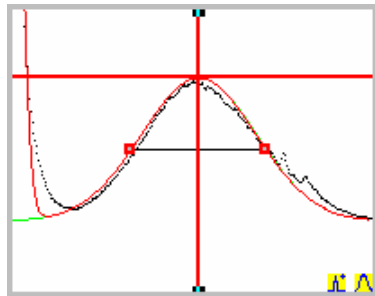


4) 피크 편집 보기 박스에서 폭 컨트롤 핸들 중 하나를 끌어 피크(분산된 검은 점)의 폭과 비슷한 정도로 이론적 커브의 폭을 넓힙니다.

피크 편집 보기 박스의  버튼을 클릭하여 보기 박스를 재설정해야 할 수도 있습니다.

5) 필요한 경우, 피크 중간 선을 왼쪽 또는 오른쪽으로 적절하게 끌어 피크 중간 점을 조정합니다.

피크 편집 보기 박스를 사용한 매개변수 값 조정



피팅 수행

1) Next 버튼을 클릭하여 Fit 페이지로 이동합니다.

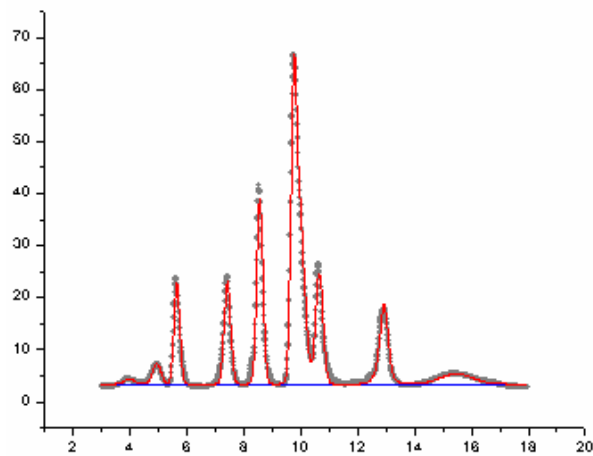
이 페이지에서는 피팅 절차의 몇 가지 정량적 속성은 물론, 신뢰 수준 및 예측 수준을 편집하는 방법과 피팅 수행 방법을 살펴보겠습니다.


2) Fit 버튼을 클릭하여 Number of Iterations 드롭다운 목록(과 Tolerance 텍스트 박스)에서 지정한 것과 같이 Levenberg-Marquardt 반복 작업을 최대 10 회까지 수행합니다.

적은 수의 반복 작업으로도 피팅 결과가 수렴해야 합니다. 출력 보기 박스에는 반복 작업을 수행한 횟수와 축소 카이제곱 값이 표시됩니다.

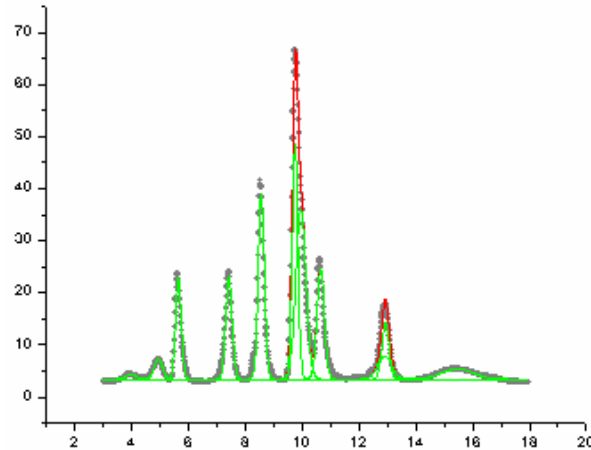
또, 마법사 그래프에는 업데이트된 피팅 커브가 표시됩니다.

피팅 수행



3) 마법사 그래프의 아래쪽에 있는 Individual Peaks 버튼을  을 클릭하여 각 피크의 피팅 커브를 표시합니다. 이 피팅 커브는 녹색 선 그림으로 표시됩니다.


개별 피크의 피팅 커브 표시




피팅 결과 보고

1) Next 버튼을 클릭하여 **Results** 페이지로 이동합니다.

이 페이지에서는 피팅 함수 매개변수, 피팅 통계, 피크 특성에 대한 보고서를 만들 때 사용되는 컨트롤이 제공됩니다. 워크시트 및 그래프 보고서도 사용할 수 있습니다.

2) 마법사 그래프 아래에 있는 **Confidence Bands** 버튼  과

Prediction Bands 버튼  을 클릭하여 신뢰대와 예측 밴드를 표시합니다. (신뢰 수준은 **Fit** 페이지에서 지정합니다.)

주의: 마법사 그래프에 신뢰대, 예측 밴드, 각 피크는 물론, 그래프 보고서도 함께 표시됩니다.

3) **Peak Characterization Report** 그룹에서 **Plot** 버튼 오른쪽의 **Options** 버튼을 클릭합니다. 그러면 **Peak Characterization Report Field Details** 대화 상자가 열립니다.

4) **Total Number of Fields** 드롭다운 목록에서 8 을 선택합니다.

5) **Report Plot** 리스트 박스의 **Available Fields** 에서 "Peak report field 8"을 선택합니다.

6) **Available Results for Display** 그룹에서 **Resolution with Next Adjacent Peak** 라디오 버튼을 선택합니다.

(보고서 필드 1-7 과 관련된 결과를 보려면 **Available Fields on Report Plot** 리스트 박스에서 원하는 보고서 필드를 선택합니다.)

Available Results for Display 그룹에서 관련 결과에 해당하는 라디오 버튼이 활성화됩니다.)

7) OK 버튼을 클릭하여 대화 상자를 닫습니다.

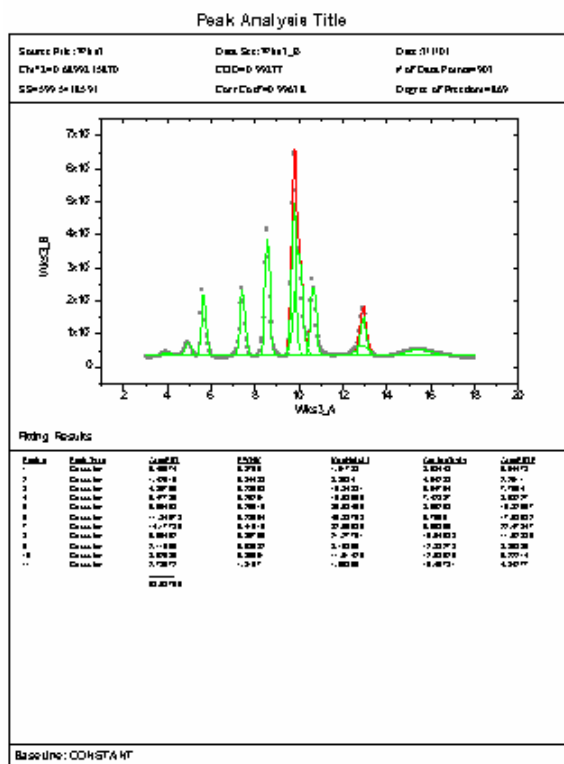
8) Peak Characterization Report 그룹에서 Plot 버튼을 클릭합니다.

Origin 프로젝트에 그래프 보고서가 생깁니다. 마법사가 활성 상태를 유지하기 때문에 그래프는 마법사 뒤에 표시됩니다.

9) Peak Fitting Wizard 를 최소화  하여 그래프 보고서를 봅니다.

10) 그래프 보고서를 속도 모드를 사용해서 표시한다는 내용의 미리 알림 메시지가 표시될 수도 있습니다. 미리 알림 메시지가 표시되면 OK 버튼을 클릭합니다.

피크 피팅 그래프 보고서



Origin 프로젝트에 피팅 함수 매개변수 워크시트 보고서가 생깁니다. 마법사가 활성 상태를 유지하기 때문에, 워크시트는 마법사 뒤에 표시됩니다.



피크 피팅 세션 종료


1) Finish 버튼을 클릭하여 Peak Fitting Wizard 를 닫고 그래프 및 워크시트 보고서에 액세스합니다.

자습서 2, 숨겨진 피크의 데이터 분석

이 자습서에서는 Peak Fitting Wizard 의 기저선 점 및 피크 찾기 알고리즘을 소개합니다. 여기에서는 PFM 에서 제공하는 샘플 데이터를 사용하여 자동으로 기저선을 찾고, 점을 라인 함수에 피팅하고, 피크를 자동으로 찾고, 결과를 이차 미분과 비교하고, 매개변수의 하한 값을 설정하고, 피팅을 수행하는 방법을 살펴보려고 합니다.

시작하기

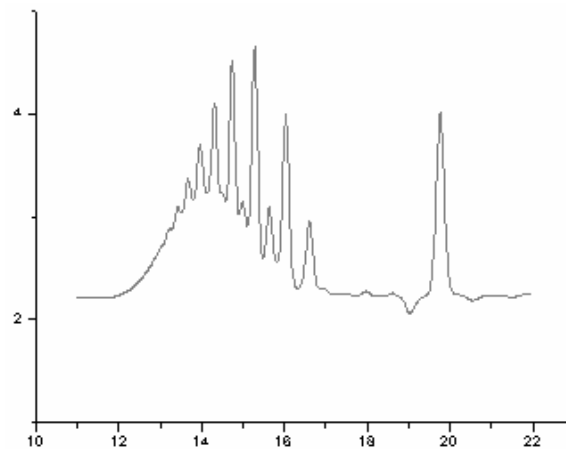
- 1) 현재 PFM_Examples.OPJ 파일이 열려 있지 않으면 새로 엽니다.
- 2) 프로젝트 탐색기에서 Chromatography Data 폴더에 있는 Graph1 그래프 창을 활성화합니다.
- 3) PFM 툴바의 Enter Peak Fitting Session 버튼  을 클릭합니다.
- 4) 마법사에서 Help 버튼 옆에 있는 빈 회색 영역을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭합니다. 그러면 단축 메뉴가 열립니다.
- 5) 단축 메뉴에서 Show Wizard Map 을 선택합니다. 그러면 메뉴 선택을 취소하여 마법사 맵을 숨길 수 있습니다.
- 6) 마법사의 Maximize 버튼  을 클릭하여 화면의 마법사 디스플레이를 최대화합니다.(주의: 자습서 1 을 절차를 따라 한 경우에는 먼저 화면을 원래대로 복원한 후 마법사를 최대화해야 할 수도 있습니다.)

7) 마법사 그래프 아래에 있는 **Line Plot** 버튼  을 클릭합니다.
마법사에서 피크 데이터가 선 데이터 그림으로 표시됩니다.

데이터 범위 선택

- 1) **Select Range** 버튼을 클릭합니다.
- 2) 왼쪽 데이터 마커를 약 $X = 11$ 정도까지 끌어 갑니다.
- 3) **ENTER** 를 눌러 마커를 고정하고 범위 선택 모드를 나갑니다.
그래프는 선택한 범위가 표시되도록 업데이트됩니다.

데이터 범위 선택



기저선 정의

- 1) **Next** 버튼을 클릭하여 **Precondition Data** 마법사 페이지로 이동합니다.
- 2) **Next** 버튼을 클릭하여 **Baseline Points** 페이지로 이동합니다.
- 3) **Auto Find** 라디오 버튼을 선택합니다.

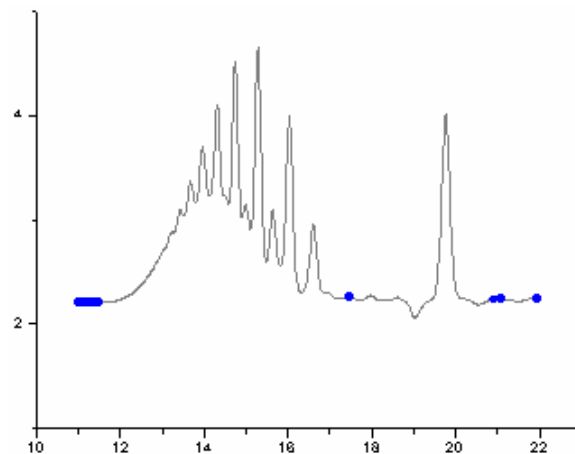
Auto Find 기저선 탐지 알고리즘에서 임계값 0 한도 내에서 스무딩된 일차 및 이차 미분의 점을 찾습니다. 현재 임계 수준의 경우 피크에서 기저선 점이 탐지됩니다.

임계 값을 위 또는 아래로 조정하여 탐지할 점의 수를 조정할 수 있는 스핀 버튼이 제공됩니다.

4) **Number of Points** 아래쪽 스핀 버튼을 한 번 클릭합니다.

결과로 생성된 기저선 점이 표시되도록 마법사 그래프가 업데이트됩니다. 이 임계 수준에서는 피크 점이 더 이상 탐지되지 않습니다.

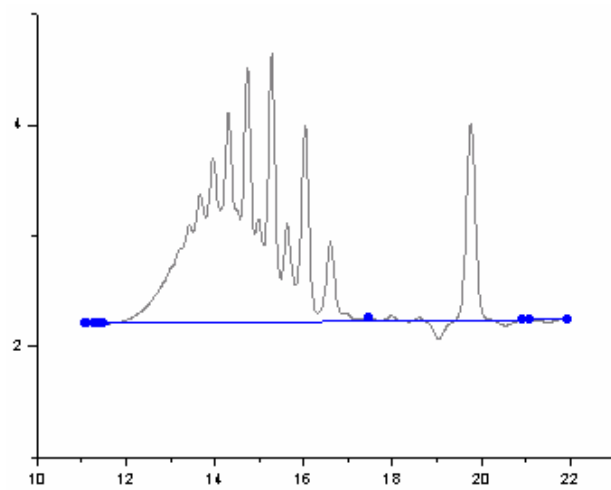
기저선 탐지 알고리즘을 사용한 기저선 점 찾기



5) **Next** 버튼을 클릭하여 **Create Baseline** 마법사 페이지로 이동합니다.

기본적으로 탐지된 기저선 점은 라인 함수를 사용하여 피팅합니다.

라인 함수를 이용한 기저선 점 피팅

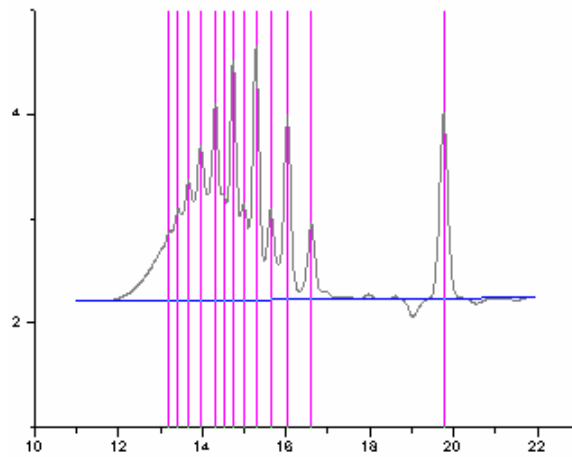



6) Next 버튼을 클릭하여 **Baseline Conditioning** 마법사 페이지로 이동합니다.

피크 찾기

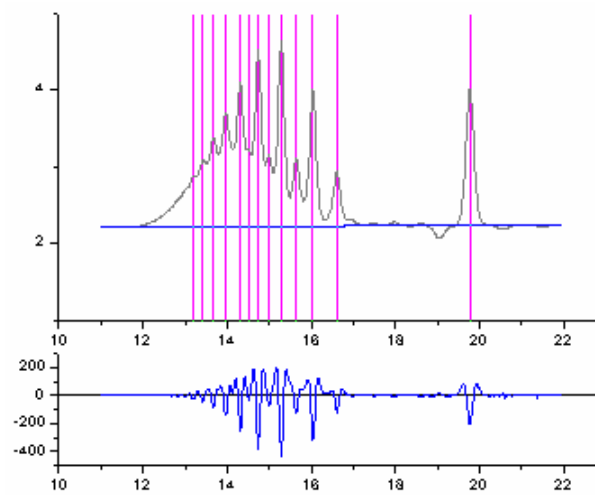
- 1) Next 버튼을 클릭하여 Peak Finding 마법사 페이지로 이동합니다.
- 2) Find Peaks 그룹에서 Threshold Height 라디오 버튼을 선택한 채로 Pick Peaks 버튼을 클릭합니다. 13 개의 피크가 검색되어 마법사 그래프에 자홍색(magenta)의 수직선으로 표시됩니다.


자동 피크 찾기



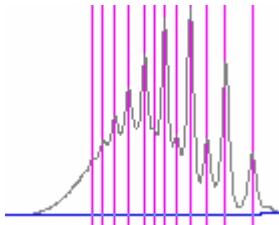
- 3) 마법사의 2nd Derivative 버튼  을 클릭하여 피크 및 기저선 그래프 레이어 아래에 이차 미분을 표시합니다.

이차 미분 표시

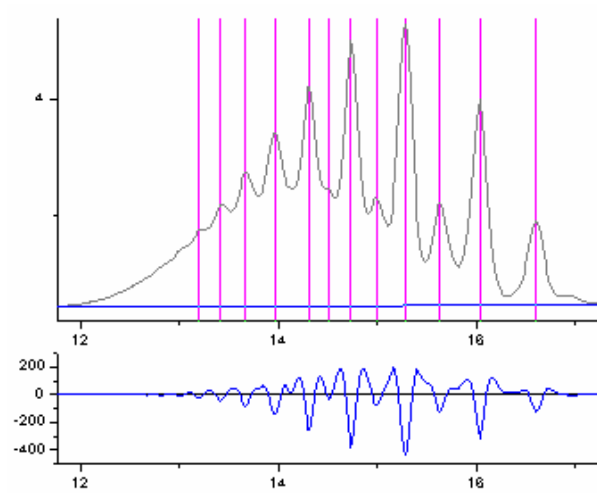


4) 마법사의 **Enlarger** 버튼  을 클릭하고 그래프에서 약 $X = 12$ 와 $X = 17$ 사이의 영역을 확대합니다(다음 그림 참조).

Enlarger 툴로 확대할 영역

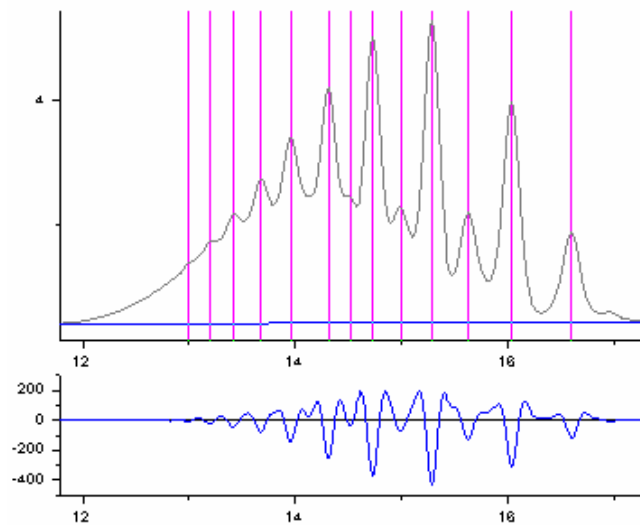



업데이트된 마법사 그래프




5) Threshold Height 아래쪽 화살표를 한 번 클릭한 후 Pick Peaks 버튼을 다시 클릭합니다. 피크 데이터에서 13 위치에 중간 점이 있는 추가 피크가 탐지됩니다.

숨겨진 추가 피크 찾기



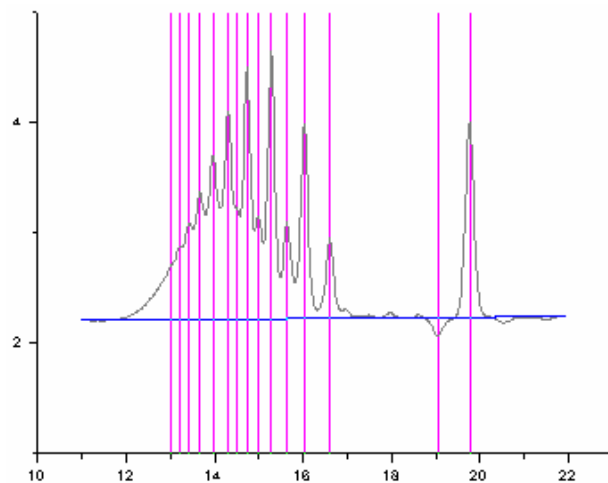
6) 마법사의 Rescale 버튼  을 클릭하여 마법사 그래프 축을 전체 범위로 재설정합니다.

7) 마법사의 2nd Derivative 버튼  을 클릭하여 이차 미분 표시를 지웁니다.

8) Next 버튼을 클릭하여 Define Peaks 마법사 페이지로 이동합니다.

9) Add 버튼을 클릭한 후 약 $X = 19$ 정도에 있는 음의 피크를 더블 클릭하여 정의합니다.

수동 피크 추가




10) Done 버튼을 클릭합니다.

11) Next 버튼을 클릭하여 Peak Edit Control 마법사 페이지로 이동합니다.

매개변수 하한 설정

매개변수에 대해 하한, 상한, 일반 선형 제한 등의 간단한 제한을 설정할 수 있습니다. 이 예에서는 두 번째 피크 영역 매개변수의 하한을 설정합니다. 여기에서는 반복 절차 중에 영역이 음의 값으로 가는 것을 막기 위해 하한을 0 으로 설정합니다.

1) 마법사의 Parameter Display 버튼  을 클릭하여 Peak Parameters Display 대화 상자를 엽니다.

2) 피크 2 의 Area 매개변수에 대해 LBound 체크 박스를 선택합니다. (팁: 먼저 Peak #2 에 해당하는 Parameter 열에서

"Area" 텍스트를 클릭합니다. 그러면 행 전체가 강조됩니다. 그리고 대화 상자를 스크롤하거나 크기를 조정하여 **LBound** 체크 박스를 표시한 후 선택합니다.)

3) 같은 매개변수에 대해 **Lower Bound** 필드를 더블 클릭하여 편집 모드에 들어갑니다. 그리고 **0.0** 을 입력합니다.

매개변수 하한 설정

Peak #	Peak Ty...	Parameter	Value	Fix	Share	Lower Bound	LBound
0	Line	P1	2.169853	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
0	Line	P2	0.003424	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
1	Gaussian	Center	13.000000	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
1	Gaussian	Area	0.110555	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
1	Gaussian	Width	0.228217	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	0.000000	<input checked="" type="checkbox"/>
2	Gaussian	Center	13.200000	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
2	Gaussian	Area	0.150611	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	0.0	<input checked="" type="checkbox"/>
2	Gaussian	Width	0.228217	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	0.000000	<input checked="" type="checkbox"/>

OK 를 클릭하여 대화 상자를 닫습니다.


피팅 수행

1) Next 버튼을 클릭하여 Fit 마법사 페이지로 이동합니다.

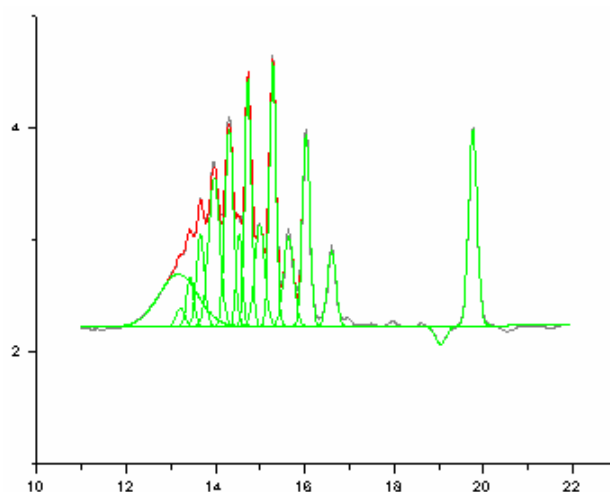
2) Fit 버튼을 클릭하여 **Number of Iterations** 드롭다운 목록(과 **Tolerance** 텍스트 박스)에서 지정한 것과 같이 **Levenberg-Marquardt** 반복 작업을 최대 10 회까지 수행합니다.

10 번 미만의 반복 작업을 수행하는 사이에 피팅 결과가 수렴해야 합니다. 출력 보기 박스에는 반복 작업을 수행한 회수와 축소 카이제곱 값이 표시됩니다.

또, 마법사 그래프에는 업데이트된 피팅 커브가 표시됩니다.

3) 마법사 그래프의 아래쪽에 있는 **Individual Peaks** 버튼  을 클릭하여 각 피크의 피팅 커브를 표시합니다.

피팅 수행



피팅 결과 보고

- 1) Next 버튼을 클릭하여 **Results** 페이지로 이동합니다.
- 2) **Peak Characterization Report** 그룹에서 **Plot** 버튼을 클릭합니다.
- 3) **Fitting Function Parameters** 그룹에서 **Worksheet** 버튼을 클릭합니다.

주의: **Origin** 프로젝트에 그래프 및 워크시트 보고서가 생깁니다.
마법사가 활성 상태를 유지하기 때문에 그래프와 워크시트는
마법사 뒤에 표시됩니다.

피크 피팅 세션 종료

- 1) **Finish** 버튼을 클릭하여 **Peak Fitting Wizard** 를 닫고 그래프 및
워크시트 보고서에 액세스합니다.


자습서 3, 사용자 정의 마법사 만들기

Peak Fitting Wizard 를 사용하여 여러 다른 데이터 집합을 분석하다 보면, 어떤 마법사 페이지에서는 아무 작업도 수행하지 않는 반면, 어떤 마법사 페이지에서는 동일한 작업을 반복 수행한다는 것을 알게 됩니다. 예를 들어, 데이터 시작 매개변수를 설정하거나 스무딩 필터를 적용하지 않아서 **Precondition Data** 페이지에서 작업을 수행하지 않는 경우가 있을 수 있습니다. 마찬가지로, 항상 **Baseline Points** 페이지에 있는 기저선 찾기 알고리즘을 사용할 수도 있습니다.

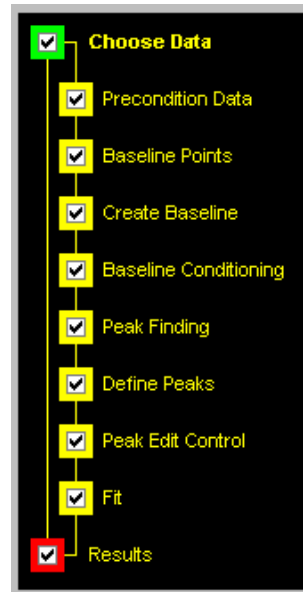
데이터를 분석할 때와 비슷한 방식으로 마법사 페이지를 훑어 가면서 사용하지 않는 페이지나 항상 동일한 동작을 수행하는 페이지를 숨기면 마법사를 단순하게 정리할 수 있습니다. 이렇게 사용자 정의된 마법사는 새 툴바 버튼에 저장하여 나중에 사용할 수 있습니다. 이 자습서에서는 사용자 정의 마법사를 만드는 프로세스를 설명합니다.

주의: 사용자 정의 마법사에 저장할 수 있는 마법사 작업 목록을 보려면 “Peak Fitting Wizard 참조”를 참조하십시오.

시작하기

- 1) 현재 PFM_Examples.OPJ 파일이 열려 있지 않으면 새로 엽니다.
- 2) 프로젝트 탐색기에서 **Chromatography Data** 폴더에 있는 **Graph5** 그래프를 활성화합니다.
- 3) PFM 툴바에서 **Enter Peak Fitting Session** 버튼  을 클릭합니다.
- 4) 마법사에서 **Help** 버튼 옆에 있는 빈 회색 영역을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭합니다. 그러면 단축 메뉴가 열립니다.
- 5) 단축 메뉴에서 **View Mode:Full** 을 선택합니다. 그러면 마법사 맵의 페이지 아이콘에 체크 박스가 추가됩니다. 이 체크 박스를 사용하면 마법사 페이지를 비활성화할 수 있습니다.

전체 보기 모드



작업을 수행하고 페이지를 숨기며 마법사 훑어보기

첫 마법사 페이지인 **Choose Data** 를 사용하여 데이터 범위를 선택할 수 있습니다. 여기서는 초기화 파일을 사용해서 **Peak Fitting Wizard** 의 설정을 초기화할 수도 있습니다. 피크 분석에 범위 선택 기능이 필요하지 않고, 초기화 파일을 읽지 않는 경우, 이 마법사 페이지를 보기에서 숨길 수 있습니다.

주의: 초기화 파일을 읽으려면 이 페이지를 보기에서 숨기지 말아야 합니다.

1) 마법사 맵의 **Choose Data** 체크 박스를 클릭하여 체크 박스를 지웁니다.

마법사 맵에서 체크 박스 지우기



그러면 마법사의 **Full View** 모드를 나가면 **Choose Data** 페이지가 숨겨진 페이지로 설정됩니다. 또, 사용자 정의 마법사를 버튼에 저장하고 나면 사용자 정의 버튼을 클릭하더라도 이 마법사 페이지가 표시되지 않습니다. 그리고, 이 페이지를 건너 뛰면 이 페이지에 있는 작업이 수행되지 않습니다.

2) 마법사 맵의 **Precondition Data** 체크 박스를 클릭하여 체크 박스를 지웁니다. 그러면 페이지가 활성화되고 마법사의 **Full View** 모드를 나가면 숨겨진 페이지로 설정됩니다. 이 페이지를 건너 뛰면 이 페이지에 있는 작업이 수행되지 않습니다.

3) 마법사 맵의 **Baseline Points** 체크 박스를 클릭하여 체크 박스를 지웁니다. 그러면 페이지가 활성화되고 마법사의 **Full View** 모드를 나가면 숨겨진 페이지로 설정됩니다.

4) **Baseline Points** 마법사 페이지의 **Auto Find** 라디오 버튼을 클릭합니다. 마법사의 기저선 찾기 알고리즘을 사용해서 기저선 점을 찾습니다.

사용자 정의 마법사를 실행하면서 이 페이지를 건너 뛰면, 마법사는 **Auto Find** 기저선 찾기 알고리즘을 자동으로 수행합니다.

5) 마법사 맵의 **Create Baseline** 체크 박스를 클릭하여 체크 박스를 지웁니다. 그러면 페이지가 활성화되고 마법사의 **Full View** 모드를 나가면 숨겨진 페이지로 설정됩니다.

Create Baseline 마법사 페이지의 **Create Baseline** 라디오 버튼이 선택되고 라인 함수가 활성화된 상태에서 **Use Function** 라디오 버튼이 선택됩니다. 이 페이지를 건너뛰면 마법사는 라인 함수를 사용하여 기저선을 자동 생성합니다.

6) 마법사 맵의 **Baseline Conditioning** 체크 박스를 클릭하여 체크 박스를 지웁니다. 그러면 페이지가 활성화되면서 마법사의 **Full View** 모드를 나가면 숨겨진 페이지로 설정됩니다. 이 페이지를 건너 뛰면 이 페이지에 있는 작업이 수행되지 않습니다.

7) 마법사 맵의 **Peak Finding** 체크 박스를 클릭하여 체크 박스를 지웁니다. 그러면 페이지가 활성화되어 마법사의 **Full View** 모드를 나가면 숨겨진 페이지로 설정됩니다.

8) **Find Peaks** 그룹에서 **Threshold Height** 라디오 버튼을 선택한 상태로 **Pick Peaks** 버튼을 클릭합니다. 마법사의 피크 탐지 알고리즘에서 마법사 그래프에 있는 네 개의 피크를 찾아 표시합니다. 이 페이지를 건너 뛰면 마법사는 피크 찾기 알고리즘을 사용해서 자동으로 피크를 찾고 표시합니다.

9) 마법사 맵의 **Define Peaks** 체크 박스를 클릭하여 체크 박스를 지웁니다. 그러면 페이지가 활성화되어 마법사의 **Full View** 모드를 나가면 숨겨진 페이지로 설정됩니다. 이 페이지를 건너 뛰면 이 페이지에 있는 작업이 수행되지 않습니다.

10) 마법사 맵(체크 박스가 아니라)의 "**Peak Edit Control**" 텍스트를 클릭합니다. 그러면 페이지는 활성화되지만 보기 상태는 변경되지 않습니다.

11) 마법사 맵의 "**Fit**" 텍스트를 클릭합니다. 그러면 페이지는 활성화되지만 보기 상태는 변경되지 않습니다.

12) **Fit** 버튼을 클릭하여 **Number of Iterations** 드롭다운 목록(과 **Tolerance** 텍스트 박스)에서 지정한 것과 같이 **Levenberg-Marquardt** 반복 작업을 최대 10 회까지 수행합니다.

13) 마법사 맵의 "**Results**" 텍스트를 클릭합니다. 그러면 페이지는 활성화되지만 보기 상태는 변경되지 않습니다.

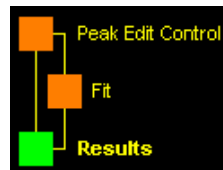
사용자 정의 절차 파일 저장

1) **Results** 페이지에서 **Save Procedure File** 체크 박스를 선택합니다.

2) 마법사에서 **Help** 버튼 옆에 있는 빈 회색 영역을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭합니다. 그러면 단축 메뉴가 열립니다.

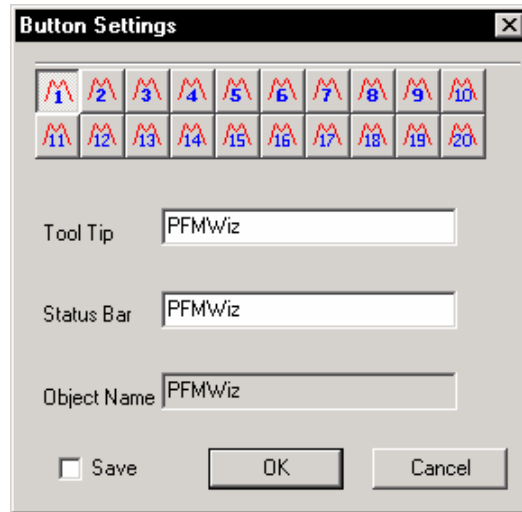
3) 단축 메뉴에서 **View Mode:Normal** 을 선택합니다. **Peak Edit Control**, **Fit**, **Results** 마법사 페이지 아이콘이 표시되도록 마법사 맵이 업데이트됩니다.

업데이트된 마법사 맵



4) **Finish** 버튼을 클릭합니다. 그러면, **Button Settings** 대화 상자가 열립니다.

Button Settings 대화 상자



- 5) 왼쪽 위 버튼을 선택한 채로 Tool Tip 과 Status Bar 텍스트 박스에 **Auto Find Baseline and Peaks** 를 입력합니다.
- 6) OK 버튼을 클릭하여 대화 상자와 Peak Fitting Wizard 를 닫습니다. 그러면 Origin 워크 스페이스에 방금 만든 버튼이 포함된 새 PFMWiz 툴바가 표시됩니다.

사용자 정의 마법사 실행

- 1) 사용자 정의 Graph5 가 아직 활성화 상태인지 확인한 후, 방금 만든 새 툴바 버튼을 클릭합니다.
(이 프로젝트 파일에서는 중복되는 데이터 집합을 사용할 수 없기 때문에 Graph5 를 다시 분석합니다. 보통은 비슷한 데이터가 있는 새 그래프 창을 활성화합니다.)
Peak Edit Control 마법사 페이지가 표시된 사용자 정의 마법사가 열립니다. 기저선은 이미 생성된 상태이고, 네 개의 피크도 모두 표시된 상태입니다.
- 2) Next 버튼을 클릭하여 Fit 페이지로 이동합니다.
- 3) Fit 버튼을 클릭하여 Levenberg-Marquardt 반복 작업을 최대 10 번까지 수행합니다.
- 4) Next 버튼을 클릭하여 Results 페이지로 이동합니다.

5) **Fitting Function Parameters** 그룹에서 **Worksheet** 버튼을 클릭합니다.

6) **Finish** 버튼을 클릭하여 사용자 정의 **Peak Fitting Wizard** 를 닫고 워크시트 보고서에 액세스합니다.

Peak Fitting 마법사 참조

소개

Enter Peak Fitting Session 버튼을 클릭하면 마법사 그래프에 활성 데이터 집합이 표시된 Peak Fitting 마법사가 열립니다.

Peak Fitting 마법사 안의 여러 곳을 이동하려면 Next(와 Back) 버튼을 클릭하거나 마법사의 왼쪽에 있는 마법사 맵 상의 페이지 아이콘을 클릭합니다. 마법사 맵에 있는 페이지 아이콘은 활성 페이지(녹색), 방문하지 않은 페이지(노란색), 이미 방문하거나 건너뛴 페이지(갈색), 마지막 마법사 페이지(빨간색)를 나타내도록 색상 코드 처리가 됩니다.

Peak Fitting 마법사에는 다음과 같은 페이지가 포함되어 있습니다.

Choose Data: 이 페이지에는 Y 피팅 데이터 집합을 선택하고 피팅 데이터 범위를 선택할 수 있는 컨트롤이 포함되어 있습니다. 이 페이지에서는 초기화 파일을 선택할 수도 있습니다. 데이터 집합 제어에 대한 보다 상세한 설명은 44 페이지의 "피크 데이터 선택"을 참조하십시오. 초기화 파일에 관한 자세한 내용을 보려면 43 페이지의 "Peak Fitting 마법사 초기화"와 91 페이지의 "초기화 파일에 설정 저장"을 참조하십시오.

Precondition Data: 이 페이지에서는 피팅을 시작하기 전에 시작 매개변수를 설정하고 스무딩 필터를 적용할 수 있습니다. 보다 상세한 설명은 46 페이지의 "데이터 시작 매개변수 설정"을 참조하십시오.

Baseline Points: 이 페이지에서는 데이터를 피팅하기 전에 기저선을 지정하는 작업의 첫 단계를 보여줍니다. 이 페이지를 편집하여 기저선 점을 선택합니다. 보다 상세한 설명은 50 페이지의 "기저선 초기화"를 참조하십시오.

Create Baseline: Baseline Points 마법사 페이지에서 기저선 점을 선택한 후, 이 페이지를 편집해서 기저선 점을 사용하여 기저선을 만드는 방법을 지정합니다. 이 페이지에는 기저선을 만들기 전에 기저선 점을 추가, 수정, 또는 삭제할 수 있는 컨트롤이 있습니다.

보다 상세한 설명은 52 페이지의 "기저선 점을 사용해서 기저선을 만드는 방법 정의"를 참조하십시오.

Baseline Conditioning: 이 페이지를 사용하면 피팅 전에 기저선 조건을 설정할 수 있습니다. Y 축을 따라 기저선을 조정하거나 피크 데이터에서 기저선을 뺄 수 있습니다. 보다 상세한 설명은 54 페이지의 "기저선 조건 설정"을 참조하십시오.

Peak Finding: 이 페이지에는 피크 함수를 지정하고 피크 위치를 추정할 때 사용되는 컨트롤이 있습니다. 보다 상세한 설명은 56 페이지의 "피크 함수 지정과 피크 찾기"를 참조하십시오.

Define Peaks: 피크 함수를 정의하고 피크를 찾은 후에는 이 페이지를 편집하여 피크를 추가, 수정, 또는 삭제합니다. 보다 상세한 설명은 64 페이지의 "피크 추가, 수정 및 삭제"를 참조하십시오.

Peak Edit Control: 이 페이지를 편집하여 각각의 피크에 다른 함수를 설정하고 이론 곡선을 조정하여 최적의 초기 매개변수 값을 얻습니다. 보다 상세한 설명은 66 페이지의 "피크별 함수 및 초기 매개변수 할당"을 참조하십시오. 보다 상세한 설명은 66 페이지의 ""을 참조하십시오.

Fit: 이 페이지를 사용하면 피팅 절차를 제어하고 피팅을 수행할 수 있습니다. 보다 상세한 설명은 74 페이지의 "피팅 절차 제어 및 피팅 수행"을 참조하십시오.

Results: 이 페이지를 사용하면 피팅 함수 매개변수와 피팅 통계, 그리고 피크 특성에 관한 보고서를 만들 수 있습니다. 또, 이 페이지에는 현재 피팅 변수 값과 매개변수 값을 초기화 파일에 저장하고 마법사 페이지 작업을 절차 파일에 저장할 때 사용되는 옵션이 있습니다. 보다 상세한 설명은 78 페이지의 "결과 보고"를 참조하십시오. 초기화 파일과 절차 파일에 관한 자세한 내용은 43 페이지의 "Peak Fitting 마법사 초기화"와 91 페이지의 "초기화 파일에 설정 저장", 그리고 92 페이지의 "사용자 정의 마법사 만들기"를 참조하십시오.

Peak Fitting 마법사에서는 다음과 같은 버튼을 사용할 수 있습니다.



매개변수 값을 수동으로 초기화하고, 매개변수 값을 고정하고, 피크 사이에서 매개변수를 공유하고, 상한과 하한, 일반적인 선형 한계를 포함하는 매개변수 제한을 설정하는 대화 상자를 엽니다. . 보다 상세한 설명은 70 페이지의 "매개변수 고정 및 공유와 제한 설정"을 참조하십시오.



마법사 그래프의 일부를 확대합니다. 보다 상세한 설명은 64 페이지의 "마법사 그래프에서 관심 부분 확대"를 참조하십시오.



확대한 마법사 그래프 축을 왼쪽과 오른쪽으로 스크롤합니다. 보다 상세한 설명은 64 페이지의 "마법사 그래프에서 관심 부분 확대"를 참조하십시오.



마법사 그래프를 전체 축 스케일로 되돌립니다. 보다 상세한 설명은 64 페이지의 "마법사 그래프에서 관심 부분 확대"를 참조하십시오.



잔류 그림을 표시합니다. 보다 상세한 설명은 77 페이지의 "잔류 값 검토를 통한 피팅 확인"을 참조하십시오.



피크 데이터의 이차 미분을 표시합니다. 보다 상세한 설명은 64 페이지의 "숨겨진 피크 찾기"를 참조하십시오.



신뢰대를 표시합니다. 보다 상세한 설명은 75 페이지의 "신뢰 수준 및 예측 밴드 수준 설정"을 참조하십시오.



예측 밴드를 표시합니다. 보다 상세한 설명은 75 페이지의 "신뢰 수준 및 예측 밴드 수준 설정"을 참조하십시오.



각 피크의 이론 곡선을 표시합니다. 보다 상세한 설명은 68 페이지의 "초기 매개변수 값 최적화"를 참조하십시오.



마법사 그래프에서 피크 데이터를 라인 또는 분산된 점 그림으로 표시합니다. 보다 상세한 설명은 44 페이지의 "피크 데이터 선택"을 참조하십시오.

Peak Fitting 마법사에서는 다음과 같은 단축 메뉴 명령을 사용할 수 있습니다.

Peak Fitting 마법사의 단축 메뉴를 열려면 마법사에서 **Help** 버튼 옆에 있는 빈 회색 영역을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭합니다.

View Mode: 마법사의 뷰 모드에는 일반(기본)과 전체의 두 가지 뷰 모드가 있습니다. 전체 뷰 모드는 마법사 디자인 모드입니다. 이 뷰 모드에는 마법사 맵의 페이지 아이콘 옆에 체크 박스가 있습니다. 이 체크 박스를 지우면 마법사 페이지를 숨길 수 있습니다. 그러면 특정 피크 분석에 맞는 사용자 정의 마법사를 만들 수 있습니다. 마법사 페이지를 숨기고 사용자 정의 마법사를 만드는 작업에 관한 자세한 내용은 "자습서 3, 사용자 정의 마법사 만들기"를 참조하십시오. 또한, 92 페이지의 "사용자 정의 마법사 만들기"를 참조하십시오.

Action Mode: 작업 모드에는 능동(기본값)과 수동의 두 가지가 있습니다. 수동 작업 모드를 사용하면 작업을 시작하지 않고도 마법사 페이지를 전환할 수 있습니다. 수동 작업 모드는 사용자

정의 마법사를 만들 때 전체 뷰 모드에서 사용할 수 있습니다. 사용자 정의 마법사 만들기에 관한 자세한 내용을 보려면 "자습서 3, 사용자 정의 마법사 만들기"를 참조하십시오. 또한, 92 페이지의 "사용자 정의 마법사 만들기"를 참조하십시오.

Show Wizard Map: 마법사의 왼쪽에 있는 마법사 맵에서는 마법사의 여러 곳으로 이동할 수 있습니다. 언제든지 단축 메뉴에서 **Show Wizard Map** 을 선택하면 마법사 맵을 숨길 수 있습니다. 마법사 맵이 숨겨져 있는 경우에는 **Next** 와 **Back** 버튼을 사용해서 이동합니다.

Open Editor: Open Editor 명령은 LabTalk Editor의 새 인스턴스에서 **Peak Fitting** 마법사의 스크립트 파일을 엽니다. *Peak Fitting* 마법사의 스크립트 파일을 변경하는 것은 좋지 않습니다.

Peak Fitting 마법사 초기화

Peak Fitting 마법사는 파일을 읽고 다음 설정을 초기화합니다.

- 1) 피크 수, 피크 함수, 기저선 함수, 초기 매개변수 값, 매개변수 공유, 매개변수 값 고정, 상한과 하한을 포함한 제한, 일반 선형 제한을 포함하는 피크 및 기저선 특성.
- 2) 피크 특성 보고서와 피팅 함수 매개변수 보고서에 표시할 결과를 포함한 보고서 설정.
- 3) 피팅 절차 속성(반복 작업 횟수와 허용 범위)과 신뢰 수준 및 예측 수준.

기본 초기화 파일은 PFM.INI 입니다. 이 파일은 Origin 폴더에 있습니다. **Peak Fitting** 마법사를 시작하면 **Choose Data** 마법사 페이지에서 기본적으로 이 초기화 파일을 선택하고, 마법사를 열 때 읽습니다. **Read** 버튼을 클릭하고 파일을 선택하면 다른 초기화 파일을 선택할 수 있습니다.

Peak Fitting 마법사의 마지막 페이지인 **Results** 페이지에서는 PFM.INI 파일 또는 지정한 사용자 정의 초기화 파일에 작성할 때 사용하는 컨트롤이 제공됩니다. 이 컨트롤은 **Initialization File** 그룹에서 **Save** 버튼을 클릭하면 사용할 수 있습니다. **Save** 버튼을 클릭하고 INI 파일을 지정하면(PFM.INI 또는 사용자 정의 파일) 피크 및 기저선 특성(1)과 보고서 설정(2)이 INI 파일에 저장됩니다. **Save** 버튼의 클릭 여부와 관계 없이, 항상 피팅 절차와 신뢰 수준 및 예측 수준 속성(3)은 현재 쓰기로 선택된 INI 파일에 저장됩니다.

따라서 **Peak Fitting** 마법사로 피크 데이터 집합을 분석하고 나면 현재 설정을 초기화 파일에 저장할 수 있습니다. 그리고 분석할

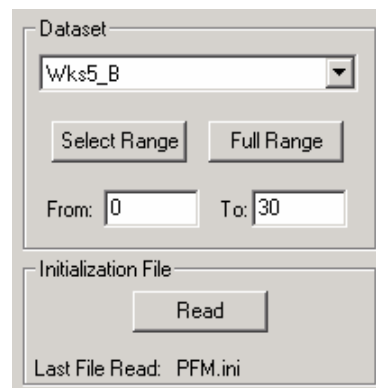
비슷한 데이터 집합을 선택할 때, 이 사용자 정의 파일을 선택하여 마법사를 초기화할 수 있습니다.

피크 데이터 선택

Choose Data 마법사 페이지에서는 Y 피크 데이터 집합을 선택하거나 피팅에 사용할 데이터 범위를 선택할 때 사용하는 컨트롤이 제공됩니다.

주의: 보다 상세한 설명은 44 페이지의 "**Peak Fitting** 마법사 초기화"를 참조하십시오.

Choose Data 마법사 페이지 컨트롤



Dataset 드롭 다운 리스트

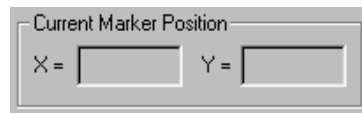
이 드롭 다운 리스트에는 현재 프로젝트의 모든 Y 데이터 집합이 있습니다. Y 열을 선택한 워크시트가 활성 상태이거나 데이터를 포함한 그래프가 활성 상태인 마법사를 열면 드롭 다운 리스트에서 Y 워크시트 열(데이터 집합) 또는 Y 데이터 집합 활성 그림이 자동으로 선택됩니다. 피크 피팅에 사용할 다른 Y 데이터 집합을 지정하려면 드롭 다운 리스트에서 그 데이터 집합을 선택합니다. Y 데이터 집합을 선택하면 **Peak Fitting** 마법사는 워크시트에서 관련 X 데이터 집합과 해당 열 조합을 자동으로 찾습니다.

드롭 다운 리스트에서 Y 데이터 집합을 선택하면 해당 데이터 집합과 관련 X 데이터 집합이 마법사 그래프에 그림으로 표시됩니다.

Select Range 버튼

피크 분석에 사용할 데이터 범위를 정의하려면 이 버튼을 클릭합니다. 이 버튼을 클릭하면 데이터 그림의 양 끝에 데이터 마커가 표시되고 마법사 그래프에서 **Data Selector** 툴이 활성화됩니다. 그리고 마법사 페이지에 **Current Marker Position** 그룹이 표시됩니다.

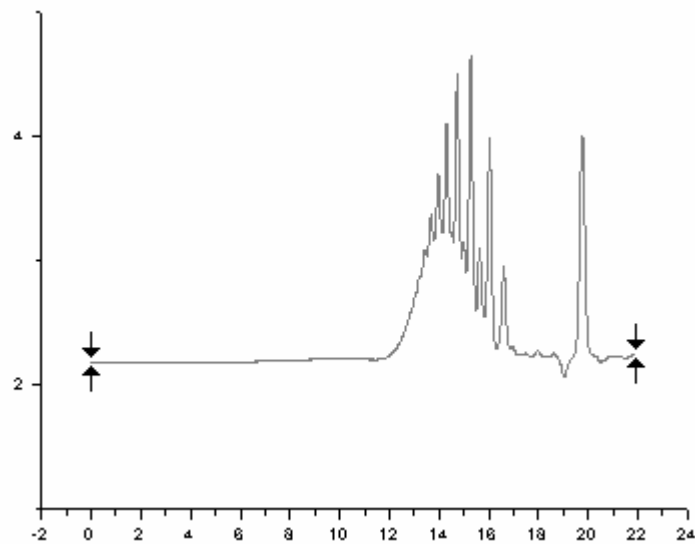
Current Marker Position 그룹



Current Marker Position

X = Y =

데이터 범위 선택



데이터 범위를 정의하려면 왼쪽 또는 오른쪽 마커를 클릭한 후 원하는 위치로 끌어 갑니다. **Current Marker Position** 그룹에 관련 데이터 점의 **XY** 값이 표시됩니다. 범위 선택이 끝나면 **ENTER**를 누르거나 마커를 더블 클릭하여 범위 선택 모드에서 나갑니다.

데이터 범위를 선택하고 나면 범위 선택에 해당하는 **X** 데이터 값이 표시되도록 **Dataset** 그룹의 **From** 과 **To** 뷰 박스가 업데이트됩니다.

Full Range 버튼



Dataset 드롭 다운 리스트에서 선택한 데이터 집합의 전체 범위를 선택하려면 이 버튼을 클릭합니다. 이전에 데이터 집합에서 일정 범위를 선택한 경우에 이 버튼을 클릭하면 데이터 마커가 전체 범위로 재설정됩니다.

주의: PFM 세션을 시작하기 전에 **Edit:Set As Begin** 과 **Set As End** 메뉴 명령을 사용해서 워크시트 표시 범위를 설정했거나 **Data Selector** 툴과 **Data:Set Display Range** 메뉴 명령을 사용해서 그래프 표시 범위를 설정한 경우, 마법사의 **Full Range** 버튼을 클릭해도, 이 범위 설정은 그대로 유지됩니다.

From 및 To 텍스트 박스

이 텍스트 박스에는 선택 범위에 해당하는 시작 및 끝 X 데이터 값이 표시됩니다. **Select Range** 버튼을 사용해서 데이터 범위를 사용자 정의하는 것 외에, 제공되는 텍스트 박스에 원하는 시작 및 끝 X 값을 입력하여 범위를 사용자 정의할 수도 있습니다. 값을 입력한 후 **TAB** 을 눌러 텍스트 박스를 업데이트하고 마법사 그래프에서 변경 사항을 봅니다.

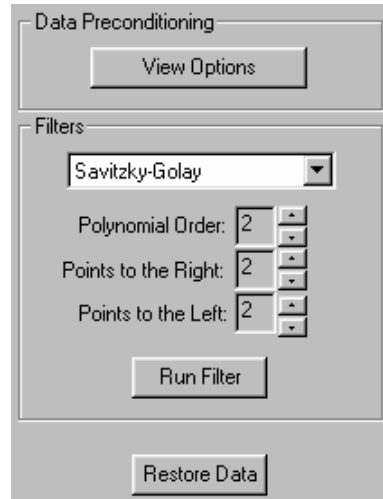
피크 데이터를 선 또는 분산 데이터 그림으로 표시

Peak Fitting 마법사에서 어느 페이지든 활성화되어 있으면 마법사 그래프에 있는 **Line Plot**  또는 **Scatter Plot**  버튼을 클릭하여 마법사 그래프의 데이터 피크 선 그림과 분산 그림 사이를 전환할 수 있습니다.

데이터 시작 매개변수 설정

Precondition Data 마법사 페이지를 사용하면 피팅을 시작하기 전에 시작 매개변수를 설정하고 데이터에 스무딩 필터를 적용할 수 있습니다.

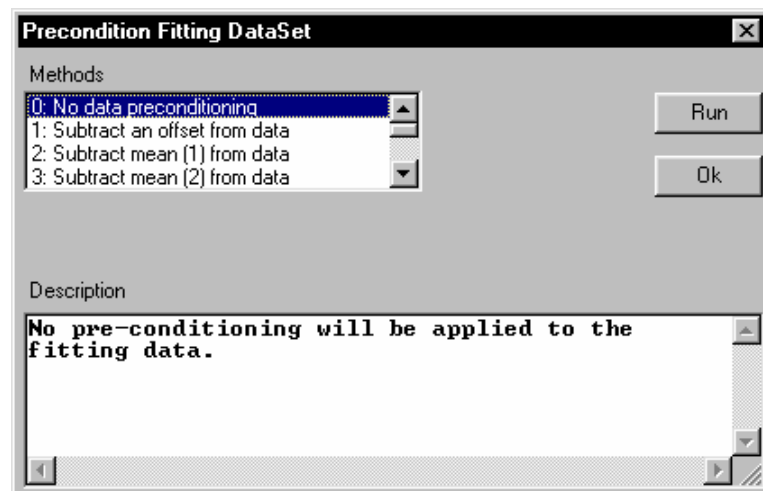
Precondition Data 마법사 페이지 컨트롤



Data Preconditioning 그룹

피팅 전에 데이터의 시작 매개변수를 설정하려면 View Options 버튼을 클릭합니다. 이 버튼을 클릭하면, Precondition Fitting Dataset 대화 상자가 열립니다.

Precondition Fitting Dataset 대화 상자



Methods 드롭 다운 리스트에서 데이터 시작 매개변수 설정 방법을 선택합니다. 선택한 방법에 따라 관련 텍스트 박스가 Methods 드롭

다운 리스트 옆에 표시됩니다. 예를 들어, **Subtract an Offset From Data** 옵션을 선택하면 **Y Offset** 텍스트 박스가 표시됩니다. **Y Offset** 텍스트 박스에 원하는 값을 입력합니다. **Description** 뷰 박스에 현재 선택한 데이터의 시작 매개변수 설정 방법이 표시됩니다. 아래에 자세한 설명이 나와 있습니다.

- 1) 데이터에서 오프셋을 뺍니다. 데이터에서 주어진 값 **Y0** 을 뺍니다.
- 2) 데이터에서 평균(1)을 뺍니다. 행 **R1** 과 **R2** 사이의 데이터를 평균한 후 결과 값을 데이터에서 뺍니다.
- 3) 데이터에서 평균(2)을 뺍니다. **X1** 과 **X2** 사이의 데이터를 평균한 후 결과 값을 데이터에서 뺍니다.
- 4) 데이터에서 평균(3)을 뺍니다. 데이터에서 첫 **N** 행의 평균을 뺍니다.
- 5) 데이터에서 평균(4)을 뺍니다. 데이터에서 마지막 **N** 행의 평균을 뺍니다.
- 6) 데이터에서 평균(5)을 뺍니다. 데이터에서 **X** 왼쪽에 있는 모든 점의 평균을 뺍니다.
- 7) 데이터에서 평균(6)을 뺍니다. 데이터에서 **X** 오른쪽에 있는 모든 점의 평균을 뺍니다.
- 8) **Shirley** 기저선 빼기(1). **Shirley** 방법(아래 주의 참조)을 사용해서 데이터를 뺍니다. **R1** 과 **R2** 는 에너지 범위에 해당하는 최소 및 최대 행 수입니다. **N0** 은 필요한 최종 기저선 높이입니다. 이 작업은 속도가 느리다는 점에 주의하십시오.
- 9) **Shirley** 기저선 빼기(2). **Shirley** 방법(아래 주의 참조)을 사용해서 데이터를 뺍니다. **E1** 과 **E2** 가 에너지 범위를 결정합니다. **N0** 은 필요한 최종 기저선 높이입니다. 이 작업은 속도가 느리다는 점에 주의하십시오.
- 10) **Tougaard** 기저선 빼기(1). **Tougaard** 방법을 사용해서 데이터를 뺍니다. **R1** 과 **R2** 는 에너지 범위에 해당하는 최소 및 최대 행 수입니다. **B1** 은 조정 가능한 매개변수입니다. 이 작업은 속도가 느리다는 점에 주의하십시오.
- 11) **Tougaard** 기저선 빼기(2). **Tougaard** 방법을 사용해서 데이터를 뺍니다. **E1** 과 **E2** 가 에너지 범위를 결정합니다. **B1** 은 조정 가능한 매개변수입니다. 이 작업은 속도가 느리다는 점에 주의하십시오.
- 12) **Tougaard** 기저선 빼기(3). **Tougaard** 방법을 사용해서 데이터를 뺍니다. **R1** 과 **R2** 는 에너지 범위에 해당하는 최소 및 최대 행 수입니다. **N0** 는 최종 기본 기저선 높이입니다. 이 작업은 속도가 느리다는 점에 주의하십시오.

13) Tougaard 기저선 빼기(4). Tougaard 방법을 사용해서 데이터를 뺍니다. E1 과 E2 가 에너지 범위를 결정합니다. N0 은 필요한 최종 기저선 높이입니다. 이 작업은 속도가 느리다는 점에 주의하십시오.

14) Straight-line 기저선 빼기(1). Straight-line 방법을 사용해서 데이터를 뺍니다. R1 과 R2 는 에너지 범위에 해당하는 최소 및 최대 행 수입니다. N0 은 필요한 최종 기저선 높이입니다. 이 작업은 속도가 느리다는 점에 주의하십시오.

15) Straight-line 기저선 빼기(2). Straight-line 방법을 사용해서 데이터를 뺍니다. E1 과 E2 가 에너지 범위를 결정합니다. N0 은 필요한 최종 기저선 높이입니다. 이 작업은 속도가 느리다는 점에 주의하십시오.

주의: Tougaard 기저선 빼기 방법에 관한 참조 정보는 S. Tougaard, *Surf. Sci.* 216, 343 (1989)을 확인하십시오. Shirley 기저선 빼기 방법에 관한 참조 정보는 D. A. Shirley, *Phys. Rev. B* 5, 4709 (1972)을 참조하십시오. 두 방법 모두에 관한 자세한 내용은 다음을 참조하십시오.: S. Tougaard and C. Jansson, "Comparison of Validity and Consistency of Methods for Quantitative XPS Peak Analysis", *Surf. Interface Anal.* 20, Issue 13, 1013.

시작 매개변수 설정 방법을 수행하려면 Run 버튼을 클릭합니다. 이 대화 상자의 편집이 끝나면 OK 버튼을 클릭합니다.

Filters 그룹

Filters 드롭 다운 리스트에서 스무딩 필터 방법을 선택합니다.

1) Savitsky-Golay 필터 방법을 사용해서 데이터를 스무딩하려면 Savitsky-Golay 를 선택합니다. Polynomial Order 스핀 박스에서 다항식의 기본 차수를 지정합니다. Points to the Left 와 Points to the Right 스핀 박스에서 스무딩 창 크기를 지정합니다. (특정 데이터 점 부근에서 스무딩 창이 비대칭으로 표시되게 할 수도 있습니다.)

주의: 이 스무딩 필터 방법을 사용하려면 X 데이터의 간격이 일정해야 합니다.

2) 인접 평균을 사용해서 데이터를 스무딩하려면 Adjacent Averaging 을 선택합니다. 관련 텍스트 박스에 숫자를 입력하여 스무딩 정도를 제어합니다. 홀수 n 을 입력하면, 각 평균 결과 계산에 n 개의 점을 사용합니다. 짝수 m 을 입력하면, 각 평균 결과의 계산에 $m+1$ 개의 점을 사용합니다. 색인 i 에서 스무딩 처리된 값은 $[i-(n-1)/2, i+(n-1)/2]$ (경계 포함) 구간에 있는 데이터 점의 평균입니다.

3) FFT 필터링을 사용해서 데이터를 스무딩하려면 FFT Filter 를 선택합니다. 스무딩 루틴에서 한 번에 고려할 점의 수를 관련 텍스트 박스에서 지정합니다. 스무딩은 주파수가 $1/(n \Delta t)$ 보다

높은 푸리에 요소를 제거하는 방식으로 이루어집니다. 여기서 n 은 한 번에 고려할 데이터 점의 수를, Δt 는 인접한 데이터 점 사이의 시간(또는 가로축) 간격을 나타냅니다.

스무딩 필터를 선택한 후에 **Run Filter** 버튼을 클릭하여 작업을 수행합니다.

Restore Data 버튼

데이터에 적용한 시작 매개변수 설정 또는 스무딩 필터를 취소하려면 이 버튼을 클릭합니다.

기저선 초기화

Baseline Points 마법사 페이지는 데이터를 피팅하기 전에 기저선을 지정하는 첫번째 단계입니다. 기저선 점을 선택(또는, 피팅 동안에 기저선이 변하도록 하는 경우의 초기화)하려면 이 페이지를 편집합니다. 상수 또는 참조 데이터 집합을 선택할 수도 있고, 그래픽 상에서 기저선 점을 정의하거나 **PFM**의 기저선 찾기 알고리즘을 사용할 수도 있습니다.

기저선 점을 그래픽 상에서 정의하거나, 기존 데이터 집합을 사용하거나, 마법사의 기저선 찾기 알고리즘을 사용한 후, 기저선 초기화가 완료되면, **Create Baseline** 마법사 페이지를 선택해서 기저선 점을 사용하여 기저선을 만드는 방법을 정의합니다. 기저선에 대해 상수를 선택하면 **Create Baseline** 마법사 페이지를 사용할 수 없습니다.

Baseline Points 마법사 페이지 컨트롤

☒ Constant
 $y = 2.5317$

☐ Auto Find
Number of points: 1

☐ User Defined
Points in data: ☒

☐ Use Existing Dataset
Wks1_B

Recreate Done

기저선 점 선택

기저선 점을 선택하는 방법에는 다음의 네 가지가 있습니다.

1) **Constant** 라디오 버튼을 선택한 후 **Y =** 텍스트 박스 값으로 결정되는 두 기저선 점을 지정합니다. 두 기저선 점은 (**XBegin**, **Y=Value**)와 (**XEnd**, **Y=Value**)입니다.

주의: 이 라디오 버튼을 선택하면 **Create Baseline** 마법사 페이지를 사용할 수 없습니다.

2) 마법사의 내부 기저선 탐지 알고리즘에 따라 기저선 점을 찾으려면 **Auto Find** 라디오 버튼을 선택합니다. 이 알고리즘은 0 임계 내에서 스무딩된 일차 및 이차 미분의 점을 찾습니다. 임계 값을 위(2 씩) 또는 아래(0.5 씩)로 조정하여 찾는 점의 수를 늘리거나 줄일 수 있는 버튼(위쪽 화살표 버튼과 아래쪽 화살표 버튼)이 있습니다. 위 또는 아래쪽 버튼을 클릭하면 결과 기저선 점이 표시되도록 마법사 그래프가 업데이트됩니다.

3) **Screen Reader** 툴을 사용해서 기저선 점을 정의하려면 **User Defined** 라디오 버튼을 선택합니다. 이 라디오 버튼을 선택하고 나면 마법사 그래프에서 **Screen Reader** 툴이 활성화되고 마법사 페이지에 **Current Marker Position** 그룹이 표시됩니다. 마법사 그래프 안의 위치를 클릭하면 **Current Marker Position** 그룹에 해당 점의 **XY** 값이 표시됩니다. 기저선 점을 정의하려면 원하는 위치를 더블 클릭하거나 한 번 클릭한 후 **ENTER** 를 누릅니다. 기저선 점의 정의가 끝나면 **Done** 버튼을 클릭합니다.

정의된 기저선 점이 데이터 집합 그림으로 가게 하려면 **Points in Data** 체크 박스를 선택합니다. 이 경우, 기저선 점을 정의한 후, **Done** 버튼을 클릭하면 **Origin** 은 각 기저선 점에 대해 원래 데이터 집합에서 가장 가까운 데이터 점(X)을 찾은 후 원래 데이터 집합 점과 같은 **Y** 값을 공유하도록 기저선 점을 이동합니다.

주의: 현재의 사용자 정의 기저선 점을 삭제하려면 **Recreate** 버튼을 클릭합니다. 그러면, 현재의 기저선 점의 선택 사항이 삭제될 뿐만 아니라, 마법사 그래프의 **Screen Reader** 툴을 다시 활성화되기도 합니다.

4) 관련 드롭 다운 리스트에서 기저선 점으로 사용할 데이터 집합을 지정하려면 **Use Existing Dataset** 라디오 버튼을 선택합니다. 드롭 다운 리스트에는 피크 데이터 집합 및 관련 피팅 데이터 집합(있는 경우)을 제외한, 프로젝트 내의 모든 **Y** 데이터 집합이 포함됩니다.

기저선 점을 사용해서 기저선을 만드는 방법 정의

Baseline Points 마법사 페이지에서 기저선 점을 초기화한 다음, Create Baseline 마법사 페이지를 편집해서 기저선 점을 사용하여 기저선을 만드는 방법을 지정합니다. 이 페이지를 사용하여 기저선 점을 추가, 수정, 또는 삭제할 수 있습니다.

주의: Baseline Points 마법사 페이지에서 Constant 라디오 버튼을 선택했으면, Create Baseline 마법사 페이지를 사용할 수 없습니다.

Create Baseline 마법사 페이지 컨트롤

The screenshot shows a wizard interface with two main sections. The top section, 'Modify Baseline Points', is disabled and contains buttons for 'Add', 'Modify', 'Delete', a checkbox for 'Points in data' which is checked, and a 'Done' button. The bottom section, 'Create Baseline', is active. It features a radio button for 'Use Function' which is selected, followed by a dropdown menu currently showing 'Line'. Below this are two more radio buttons: 'Connect points with line' and 'Connect points with spline', both of which are currently unselected.

기저선 점 수정

기저선 수정 툴에 액세스하려면 Modify Baseline Points 라디오 버튼을 선택합니다.

주의: 기저선 점을 수정한 후에는 이 마법사 페이지의 Baseline 라디오 버튼을 선택하고 기저선 점을 사용해서 기저선을 만드는 방법을 지정해야 합니다. 이 단계를 완료할 때까지는 마법사에서 작업을 진행할 수 없습니다.

1) 기저선 점을 추가하려면 Add 버튼을 클릭합니다. 그러면, 마법사 그래프의 Screen Reader 툴이 활성화됩니다. 그리고, 마법사 페이지에는 Current Marker Position 그룹이 표시됩니다. 마법사

그래프의 내부를 클릭하면 **Current Marker Position** 그룹에 해당 점의 **XY** 값이 표시됩니다. 기저선 점을 추가하려면 원하는 위치를 더블 클릭하거나 한 번 클릭한 후 **ENTER** 를 누릅니다. 기저선 점 추가가 끝나면 **Done** 버튼을 클릭합니다.

정의된 기저선 점이 그려진 데이터 집합으로 가게 하려면 **Points in Data** 체크 박스를 선택합니다. 이 경우, 기저선 점을 정의하고 **Done** 버튼을 클릭하면 **Origin** 은 각 기저선 점에 대해 원래 데이터 집합에서 가장 가까운 데이터 점(X)을 찾은 후, 원래 데이터 집합 점과 같은 **Y** 값을 공유하도록 기저선 점을 이동합니다.

2) 기저선 점을 수정하려면 **Modify** 버튼을 클릭합니다. 그러면, 마법사 그래프에서 **Data Reader** 툴이 활성화됩니다. 데이터 점을 새 위치로 끌어 갑니다. 데이터 점의 위치 수정이 끝나면 **Done** 버튼을 클릭합니다.

3) 기저선에서 점을 삭제하려면 **Delete** 버튼을 클릭합니다. **Delete** 버튼은 마법사 그래프에서 **Data Reader** 툴을 활성화합니다. 원하는 데이터 점을 더블 클릭하여 삭제합니다. 대신에, 점을 클릭한 후 **ENTER** 를 눌러 삭제할 수도 있습니다.

함수와 기저선 점 피팅

기저선 점을 사용해서 기저선을 만드는 방법을 선택하려면 **Create Baseline** 라디오 버튼을 지정합니다.

Use Function 라디오 버튼을 선택한 후 드롭 다운 리스트에서 피팅 함수를 선택합니다. 다음과 같은 기저선 함수가 제공됩니다.

Line	Poly5	ExpGrow2
Parabola	ExpDec1	Hyperbl
Cubic	ExpDec2	
Poly4	ExpGrow1	

이 함수에 관한 자세한 내용은 "피크 및 기저선 함수 참조"를 참조하십시오.

선으로 기저선 점 연결

기저선 점을 사용해서 기저선을 만드는 방법을 선택하려면 **Create Baseline** 라디오 버튼을 지정합니다.

연속된 기저선 데이터 점 사이에 직선을 표시하려면 **Connect Points with Line** 라디오 버튼을 선택합니다.

스플라인으로 기저선 점 연결

기저선 점을 사용해서 기저선을 만드는 방법을 선택하려면 **Create Baseline** 라디오 버튼을 지정합니다.

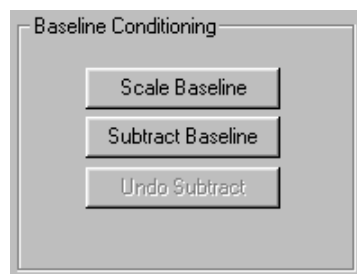
기저선 데이터 점을 입방체 스플라인 연결로 연결하려면 **Connect Points with Spline** 라디오 버튼을 선택합니다.

주의: 피크 데이터 집합의 점의 개수가 900 개를 초과하면 이 라디오 버튼을 사용할 수 없습니다.

기저선 조건 설정

기저선을 만든 후에는 **Baseline Conditioning** 마법사 페이지를 편집하여 Y 축을 따라 기저선을 이동하거나 피크 데이터에서 기저선을 뺍니다.

Baseline Conditioning 마법사 페이지 컨트롤



Y 축을 따라 기저선 조정

피크 데이터 그림의 지정된 위치에서 Y 축을 따라 기저선을 움직이려면 **Scale Baseline** 버튼을 클릭합니다. **Scale Baseline** 버튼을 클릭하고 나면 **Data Display** 툴이 열리고 마법사 페이지에 **Current Marker Position** 그룹이 표시됩니다. 마법사 그래프의 피크

데이터 그림에서 데이터 점을 클릭하면 해당 XY 값이 **Current Marker Position** 그룹에 표시됩니다. 원하는 위치를 더블 클릭하거나, 한 번 클릭한 후 **ENTER** 를 누릅니다. **Origin** 은 같은 X 값에서의 기저선 데이터에 해당하는 Y 값을 찾습니다. 그 다음, **Origin** 은 피크 Y 값과 기저선 Y 값 사이의 차이를 계산하고 이 값을 전체 기저선에 추가합니다.

피크 데이터에서 기저선 빼기

피크 데이터에서 기저선을 뺄 것인지 여부를 결정하려면, 피크 데이터의 관련 피크 수와 기저선의 복잡도를 고려해야 합니다.

일반적으로 피크 데이터에 있는 피크 수가 많거나 기저선이 매우 복잡하면 피크 데이터를 피팅하기 전에 피크 데이터에서 기저선을 빼는 것이 좋습니다. 피크 데이터에서 기저선을 빼는 대신 기저선과 피크 데이터를 피팅하면(기저선 변화 허용), 피팅 프로세스 중에 기저선에 인접한 작은 피크 때문에 기저선이 빗나갈 수 있습니다. 피크 데이터의 피크 모양과 모델 사이의 작은 차이로 인해 피팅 프로세스 중에 기저선이 빗나갈 수도 있습니다.

또한, 기저선을 빼면 카이제곱 최소화 알고리즘에서 처리할 매개변수의 차원 수가 줄기 때문에 피팅 품질을 향상시킬 수 있습니다.

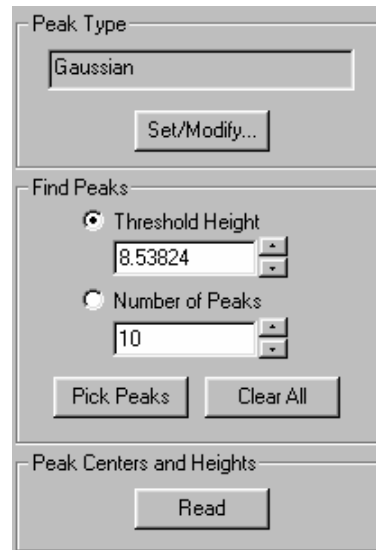
피크 데이터와 함께 기저선을 피팅하는 경우에 얻을 수 있는 가장 큰 장점은 기저선 빼기 프로세스 중에 피팅 프로세스에서 발생할 수 있는 추가 오류를 피할 수 있다는 점입니다. 피크와 함께 기저선을 피팅하면, 피팅 모델은 모든 데이터를 설명하며 따라서 통계적으로 완전한 피팅이 됩니다.

피크 함수 지정과 피크 찾기

기저선을 만들고 시작 매개변수를 설정한 후에는 **Peak Finding** 마법사 페이지를 편집하여 피크 함수를 지정하고 피크 위치를 예상합니다.

주의: **Peak Edit Control** 마법사 페이지에서 개별 피크에 대해 각기 다른 함수를 지정할 수도 있습니다. 보다 상세한 설명은 66 페이지의 "피크별 함수 및 초기 매개변수 할당" 을 참조하십시오.

Peak Finding 마법사 페이지 컨트롤



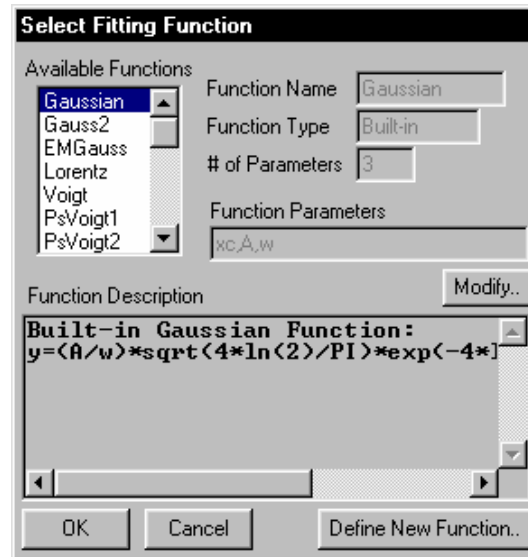
The image shows a 'Peak Finding' wizard dialog box with three main sections. The first section, 'Peak Type', contains a text box with 'Gaussian' and a 'Set/Modify...' button. The second section, 'Find Peaks', has two radio buttons: 'Threshold Height' (selected) and 'Number of Peaks'. Below 'Threshold Height' is a text box with '8.53824' and up/down arrows. Below 'Number of Peaks' is a text box with '10' and up/down arrows. At the bottom of this section are 'Pick Peaks' and 'Clear All' buttons. The third section, 'Peak Centers and Heights', contains a 'Read' button.

피크 함수 선택

피크 데이터에 사용할 피팅 함수를 선택하려면 **Set/Modify** 버튼을 클릭합니다. 내장 함수를 선택할 수도 있고 수정된 내장 함수 또는 사용자 정의 함수를 선택할 수도 있습니다. 관련 대화 상자를 편집한 후 **Peak Finding** 마법사 페이지로 돌아가면 관련 뷰 박스에 함수 이름이 표시됩니다.

Set/Modify 버튼을 클릭하면, **Select Fitting Function** 대화 상자가 열립니다.

Select Fitting Function 대화 상자



Available Functions 리스트 박스에는 사용할 수 있는 피크 피팅 함수가 표시됩니다. 기본적으로 다음과 같은 피크 함수가 제공됩니다.

Gaussian	Asym2Sig	Sine
Gauss2	Weibull3	SineSqr
EMGauss	LogNormal	SineDamp
Lorentz	GCAS	Power2
Voigt	ECS	Pulse
PsVoigt1	CCE	DLL_Func *
PsVoigt2	BiGauss	
Pearson7	InvsPoly	

주의: DLL_Func 는 외부 DLL 에 제공되는 샘플 피크 피팅 함수입니다. 외부 DLL 함수 사용에 관한 자세한 내용은 "피크 및 기저선 함수 참조"를 참조하십시오.

모든 내장 함수는 이 리스트 박스에 있습니다. 함수 리스트를 수정하려면 Origin 소프트웨어 폴더에 있는 PFM.INI 파일의 [FittingFunctions] 섹션을 편집합니다. 이 함수에 관한 자세한 내용은 "피크 및 기저선 함수 참조"를 참조하십시오.

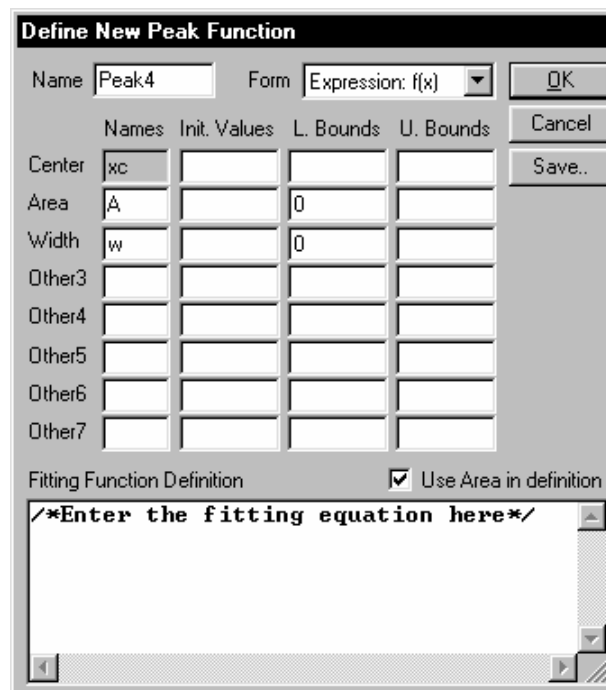
Available Functions 리스트 박스에서 함수를 선택하면 Function Name, Function Type, # of Parameters, Function Parameters, Function Description 뷰 박스가 관련 함수 정보를 표시하도록

업데이트됩니다. 이 정보는 \FITFUNC 하위 폴더에 있는 함수 FDF 파일에서 찾아 볼 수 있습니다.

새 함수 수정 및 정의

Available Functions 리스트 박스에 나열된 함수를 수정하려면 Modify 버튼을 클릭합니다. 새 피팅 함수를 정의하려면 Define New Function 버튼을 클릭합니다. 두 버튼은 모두 비슷한 대화 상자를 엽니다. 하지만, 대화 상자의 제목과 작업은 기존 함수를 수정하는지 또는 새 함수를 정의하는지에 따라 달라집니다.

Define New Peak Function(또는 Modify Peak Function) 대화 상자



The dialog box titled "Define New Peak Function" contains the following elements:

- Name:** A text field containing "Peak4".
- Form:** A dropdown menu set to "Expression: f(x)".
- Buttons:** "OK", "Cancel", and "Save..".
- Table:** A table with 4 columns: "Names", "Init. Values", "L. Bounds", and "U. Bounds".

	Names	Init. Values	L. Bounds	U. Bounds
Center	xc			
Area	A		0	
Width	w		0	
Other3				
Other4				
Other5				
Other6				
Other7				
- Fitting Function Definition:** A section with a checkbox "Use Area in definition" which is checked. Below it is a text area with the placeholder text "/*Enter the fitting equation here*/".

기존 함수를 수정하는 경우에는 이 대화 상자를 편집하여 함수 이름을 변경하거나, 매개변수를 초기화하거나, 상한 및 하한을 정의합니다. 사용자 정의 함수를 수정하는 경우에는 함수 정의도 수정할 수 있습니다. 내장 함수의 경우에는 함수 설명을 수정할 수 없습니다.

새 함수를 정의하는 경우에는 이 대화 상자를 편집하여 함수 이름을 설정하고, 함수 식을 선택하고, 함수를 정의하고, 매개변수를 초기화하고, 상한과 하한을 정의합니다.

함수 이름 설정

Name 텍스트 박스에는 기본 함수 이름이 표시됩니다. 새 함수의 경우에는 **Peak n** 과 같은 기본 이름이 제시됩니다. 이 이름을 수정할 수는 있지만 이미 사용 중인 이름은 사용하지 마십시오.

함수 식 선택

Define New Peak Function 대화 상자에서 사용할 수 있는 사용자 정의 함수의 식에는 다음의 세 가지가 있습니다.

Expression: $f(x)$

Script: $y=f(x)$

Conv: $y=f(t)*g(x-t)$

1) Expression:

다음과 같은 수식 형식으로 함수를 정의합니다.

$Y0+A*X+B*X*X$

여기서 $Y0$, A , B 는 매개변수를 X 는 독립 변수를 나타냅니다. 이 형식의 사용자 정의 함수는 수행 속도가 빠릅니다.

2) Script

이 식을 사용하면 다음과 같이 여러 행과 중간 변수를 가진 함수를 정의할 수 있습니다.

$temp1=A*X;$

$temp2=B*X*X;$

$Y=temp1+temp2+C;$

여기서 $temp1$ 과 $temp2$ 는 임시 변수입니다. Y 는 종속 변수입니다. 이 식의 장점은 큰 함수를 쉽게 정의할 수 있다는 것입니다.

다음 예에서는 **Gaussian** 함수의 수정 버전인 피크 함수를 정의합니다.

$$y = \frac{A}{w\sqrt{\frac{\pi}{2}}} \cdot e^{-2\left[\left(\frac{x-xc}{w}\right)^2 + B\left(\frac{x-xc}{w}\right)^4\right]}$$

a. **Name** 텍스트 박스에 **My Func**라고 입력합니다.

b. **Form** 드롭 다운 리스트에서 "**Script $y=f(x)$** "를 선택합니다.

c. Fitting Function Definition 텍스트 박스에 다음과 같은 함수 정의를 입력합니다.

temp1=(X-XC)/W;

temp2=temp1*temp1;

Y=A*exp(-2*(temp2+B*temp2*temp2))/(W*sqrt(PI/2));

Temp1 과 **temp2** 는 임시 변수입니다.

d. "Other3" 매개변수의 Names 텍스트 박스에 **B** 를 입력합니다.

e. In the Init. B 의 Values 텍스트 박스에 **0.05** 를 입력합니다.

f. B 의 L. Bounds 텍스트 박스에 **0** 을 입력합니다.

g. 이 정의의 영역에서 Use Area in Definition 체크 박스가 **A** 로 선택되어 있는지 확인합니다.

h. Save 버튼을 클릭한 후 OK 버튼을 클릭하여 대화 상자를 닫습니다.

이제 Select Fitting Function 대화 상자의 Available Functions 리스트 박스에서 MyFunc 함수를 사용할 수 있습니다.

3) Convolution

내장 함수의 컨볼루션에 해당하는 새 피팅 함수를 정의할 수 있습니다. 다음 예에서는 Lorentzian 과 Gaussian 함수의 컨볼루션 함수(즉 Voigt 함수)를 정의합니다.

a. Name 텍스트 박스에 **MyConv** 라고 입력합니다.

b. Form 드롭 다운 리스트에서 "Conv y=f(t)*g(x-t)"를 선택합니다.

c. Fitting Function Definition 텍스트 박스에 다음과 같은 함수 정의를 입력합니다.

%func1=gaussian(0,A,wG); /*%func1 is a placeholder.*/

%func2=lorentz(xc,1,wL);

y=conv(-100,+100,%func1,%func2,1.0e-3);

이 예에서 Gaussian 과 Lorentz 는 각각 세 개의 매개변수를 취하는 내장 함수입니다. 이 인스턴스에서 독립 변수는 명시되어 있지 않습니다. 두 함수의 컨볼루션으로 정의되는 함수에서는 일부 매개변수에 단순화 값을 사용해야 합니다. 이 예에서 Gaussian 피크 중간 점은 0 으로, Lorentzian 영역은 1 로 설정되어 있습니다. 이것은 함수에 매개변수가 너무 많이 사용되는 것을 방지하기 위한 조치입니다. 이 예의 컨볼루션에 대한 X 범위로

'[-100,+100]'가 선택되어 있지만, 최대 범위

[-1.0e-60,1.0e60]를 포함한 어떤 범위든 사용할 수 있습니다.

conv() 함수의 마지막 인수(1.0e-3)는 컨볼루션 평가에 사용되는 정밀도입니다.

- d. Width 매개변수의 이름을 **w** 에서 **wG** 로 변경합니다.
 - e. "Other3" 매개변수의 Names 텍스트 박스에서 **wL** 을 입력합니다.
 - f. wL 의 L. Bounds 텍스트 박스에서 **0** 을 입력합니다.
 - g. 이 정의의 영역에서 Use Area in Definition 체크 박스가 **A** 로 선택되어 있는지 확인합니다.
 - h. Save 버튼을 클릭한 후 OK 버튼을 클릭하여 대화 상자를 닫습니다.
- 이제 Select Fitting Function 대화 상자의 Available Functions 리스트 박스에서 MyConv 함수를 사용할 수 있습니다.

매개변수 이름 할당

나타나는 Names 텍스트 박스에 매개변수 이름을 입력합니다. 처음 세 개의 매개변수 앞에는 **xc**(중간 점), **A**(영역 또는 높이), **w** (폭)이 와야 합니다.

주의: Use Area in Definition 체크 박스를 선택한 경우에는 피크 함수 정의의 두 번째 매개변수가 피크 영역입니다. 체크 박스가 선택되지 않은 경우에는 피크의 높이입니다. 기본값은 영역을 사용하는 것입니다.

초기 매개변수 값 할당

나타나는 Init. Values 텍스트 박스에 초기 매개변수 값을 입력합니다. 이 값을 사용해서 피팅 함수를 초기화합니다.

하한 및 상한 정의

제공되는 L. Bounds 및 U. Bounds 텍스트 박스에서 매개변수의 하한과 상한을 입력합니다. 마법사에서는 항상 피크 함수의 매개변수에 해당하는 일부 제한(상한 또는 하한)을 미리 설정합니다. 예를 들어, 영역(A)과 폭(w)은 항상 0 보다 큰 하한 값을 갖습니다.

피팅 함수 정의

이 텍스트 박스에 피팅 함수의 정의를 입력합니다.

함수 저장

Save 버튼을 눌러 함수 정의 파일에 현재 대화 상자 설정을 저장합니다. 또한, 함수가 Select Fitting Function 대화 상자의 Available Functions 드롭 다운 리스트에 추가됩니다.

피크 자동 찾기

피크 데이터에서 양의 피크와 음의 피크를 찾으려면 **Pick Peaks** 버튼을 클릭합니다. 마법사 그래프에서 피크는 녹색 수직선으로 표시됩니다. 이 피크 위치를 보면 피팅 중에 초기 매개변수에 사용되는 피크의 중간 점과 높이를 예상할 수 있습니다.

주의: 다음 마법사 페이지(**Define Peaks**)에서 피크를 추가, 수정, 삭제할 수 있습니다.


1) Threshold Height 라디오 버튼을 선택하고 **Pick Peaks** 버튼을 클릭하면 피크 찾기 알고리즘에서 피크 데이터의 스무딩된 이차 미분을 검색하여 잡음 임계 값 위의 피크를 찾습니다. 잡음 임계 값은 원래 피크 데이터의 표준 미분이며 관련 조합 박스에서 올리는 방법으로 내려 피크를 추가 또는 제외할 수 있습니다. (이 값을 올리면 알고리즘에서 찾는 피크의 수가 줄어듭니다.)

2) Number of Peaks 라디오 버튼을 선택하고 **Pick Peaks** 버튼을 클릭하면 피크 찾기 알고리즘에서 피크 데이터의 스무딩된 이차 미분을 검색하여 가장 큰 n 개의 피크를 찾습니다. 여기서 n 은 관련 조합 박스에서 지정합니다. 잡음 임계 값 위의 피크를 찾습니다.

Threshold Height 또는 **Number of Peaks** 조합 박스를 편집하고 나면 **Pick Peaks** 버튼을 클릭하여 결과 피크 마커가 표시되도록 마법사를 업데이트합니다. 피크 찾기 선택을 미세 조정하려면 조합 박스를 계속 다시 편집하면서 **Pick Peaks** 버튼을 클릭합니다.

주의: **Peak Finding** 마법사는 데이터 집합 당 최대 240 개의 피크를 지원합니다.

데이터의 일부를 확대하여 피크 찾기 알고리즘 결과를 더 자세히 볼 수 있습니다. 그러려면, 마법사 그래프 아래에 있는 **Enlarger**

버튼  을 클릭한 후 마법사 그래프에서 관심이 있는 영역을 끕니다. X 축을 스크롤하고 전체 축 스케일로 복원하는 버튼도 사용할 수 있습니다. 이 버튼에 대한 자세한 설명은 64 페이지의 "피크 추가, 수정 및 삭제"를 참조하십시오.

피크 마커를 삭제하려면 **Clear All** 버튼을 클릭합니다.

데이터 파일에서 피크 정의

데이터 집합(ASCII 파일로 저장된)을 사용하여 피크 데이터에서 피크 위치를 정의하려면 **Peak Centers and Heights** 그룹의 **Read** 버튼을 클릭합니다. 그러면, **Read Peak Centers and Heights** 대화 상자가 열립니다. 파일을 선택하고 **Open** 버튼을 클릭하면 마법사

그래프는 데이터 파일의 XY 값에 따라 피크의 값이 표시되도록 업데이트됩니다.

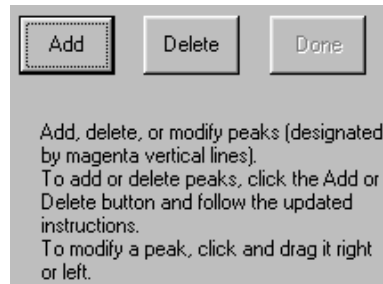
이 옵션은 비슷한 데이터 집합에서 피크 피팅을 수행하는 경우에 가장 유용합니다. 첫 데이터 집합에서 피크 피팅을 수행하고 나면 **Results** 마법사 페이지에서 피크 중간 점 및 높이를 ASCII 파일에 저장할 수 있는 버튼이 표시됩니다. 그리고 다음(비슷한) 데이터 집합을 분석할 때 **Read** 버튼을 클릭하면 현재 데이터의 피크 마커를 결정하는 이전에 저장된 피크 중간 값 및 높이에 액세스할 수 있습니다.

피크 중간 값과 높이를 ASCII 파일로 저장하는 것에 관한 자세한 내용은 91 페이지의 "피크 위치를 ASCII 파일에 저장"을 참조하십시오.

피크 추가, 수정 및 삭제


피크 함수를 정의한 후, 마법사의 내부 피크 찾기 알고리즘 또는 ASCII 데이터 파일을 사용해서 피크를 찾고 나면, **Define Peaks** 마법사 페이지를 편집하여 피크를 추가, 수정, 또는 삭제합니다.

Define Peaks 마법사 페이지 컨트롤



마법사 그래프에서 관심 부분 확대

마법사 그래프에서 피크 마커를 추가, 수정, 또는 삭제하려면 먼저


마법사 그래프의 **Enlarger** 버튼 을 사용해서 데이터 섹션을 확대합니다. 이 버튼을 클릭한 다음, 관심이 있는 피크의 주위에 사각형을 그립니다. 그리고 마우스 버튼을 놓으면 그래프상에는


선택된 부분의 데이터만 나타냅니다. 관심 영역을 확대하고 난 다음,

Enlarger 버튼 옆에 있는 Scroll Left  와 Scroll Right  버튼을 클릭하여 X 축을 따라 스크롤할 수 있습니다. 전체 축 스케일로 돌아가려면 마법사의 Rescale  버튼을 클릭합니다.

숨겨진 피크 찾기

마법사의 내부 피크 찾기 알고리즘(Peak Finding 마법사 페이지)은 피크 데이터의 스무딩된 이차 미분을 검색하여 숨겨진 피크도 찾아낼 수 있도록 디자인되었습니다. 이 피크 찾기 알고리즘을 건너뛰고 수동으로 피크(숨겨진 피크 포함)를 찾는 경우나, 피크 찾기 알고리즘에서 숨겨진 피크를 모두 찾지 못한 경우에는


마법사에 있는 2nd Derivative 버튼  을 사용할 수 있습니다. 피크 데이터 아래의 그래프 레이어에 이차 미분을 표시하려면 이 버튼을 클릭합니다. 이차 미분이 최소값에 도달하는 점은 피크 데이터를 나타내며, 작거나 숨겨진 피크를 나타낼 수도 있습니다. Enlarger

버튼  을 사용하면 이차 미분 또는 피크 데이터의 일부를 확대할 수 있습니다.

이차 미분 표시를 켜고 후에 새 피크를 정의하려면 Add 버튼을 클릭합니다. 그러면, 마법사 그래프의 Screen Reader 툴을 활성화됩니다. 이차 미분을 안내선으로 사용하여 피크 위치를 더블 클릭하면 고정할 수 있습니다. 보다 상세한 설명은 65 페이지의 "새 피크 마커 추가"를 참조하십시오.

이차 미분 표시를 끄려면 2nd Derivative 버튼을 다시 클릭합니다.

이차 미분을 표시하여 숨겨진 피크를 찾는 것 외에도, 피팅을

수행한 후에(Fit 마법사 페이지에서) Residuals 버튼  을 클릭하여 잔류 그림을 검토할 수 있습니다. 잔류 그림은 피팅 곡선과 실제 데이터 점 사이의 차이를 나타냅니다. 표시되지 않는 숨겨진 피크는 보통 잔류 그림에서 피크로 표시됩니다. 보다 상세한 설명은 74 페이지의 "피팅 절차 제어 및 피팅 수행"을 참조하십시오.

새 피크 마커 추가

피크 데이터에서 새 피크 위치를 정의하려면 Add 버튼을 클릭합니다. Add 버튼은 마법사 그래프의 Screen Reader 툴을 활성화합니다. 마법사 페이지에는 Current Marker Position 그룹이

표시됩니다. 마법사 그래프 안쪽을 클릭하면 **Current Marker Position** 그룹에 해당 점의 **XY** 값이 표시됩니다. 피크 마커를 정의하려면 원하는 위치를 더블 클릭하거나 한 번 클릭한 후 **ENTER** 를 누릅니다. 피크 위치가 피팅 중에 시작 매개변수 값에 사용되는 피크 중간 값 **높이**를 예상하는데 사용된다는 점을 주의하십시오. 피크 마커 정의가 끝나면 **Done** 버튼을 클릭합니다.

피크 마커의 X 위치 수정

피크 마커의 위치를 수정하려면 피크 마커 선을 원하는 위치로 끌어 갑니다. 마커를 끌어다 놓으면, 마법사 페이지에 마커의 현재 **X** 위치가 표시된 **Current Marker Position** 그룹이 나타납니다.

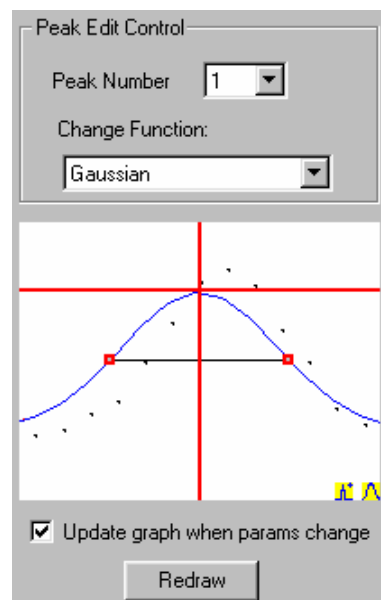
피크 마커 삭제

피크 데이터에서 피크 마커를 삭제하려면 **Delete** 버튼을 클릭합니다. 피크 마커를 삭제하려면 피크 마커 선을 한 번 클릭합니다. 피크 마커 삭제가 끝나면 **Done** 버튼을 클릭합니다.

피크별 함수 및 초기 매개변수 할당

Peak Edit Control 마법사 페이지를 활성화하면 마법사 페이지에는 각 피크에 피팅할 현재 선택된 함수와 각 피크 함수의 시작 매개변수 값을 나타내는 이론적 곡선(빨간색 선 그림)이 표시됩니다. 이 마법사 페이지를 편집하면 개별 피크에 각기 다른 함수를 설정하고 이론적 곡선을 시각적으로 조정하여 가장 적합한 시작 매개변수 값을 얻을 수 있습니다.

Peak Edit Control 마법사 페이지 컨트롤

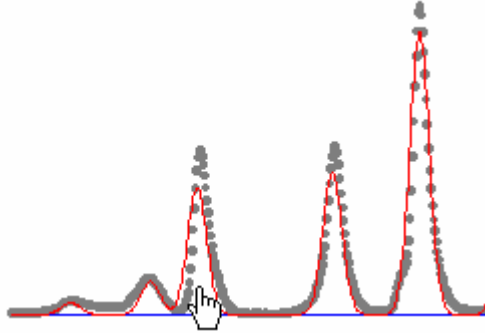


활성 피크 선택

Peak Number 드롭 다운 리스트에서 원하는 피크 수를 선택하여 피크를 활성화합니다. 현재 드롭 다운 리스트의 선택 항목을 더블 클릭한 후 원하는 피크 수를 입력할 수도 있습니다. 데이터 집합의 피크는 왼쪽에서 오른쪽으로 나열됩니다.

마법사 그래프에서 피크를 클릭하여 활성 피크를 선택할 수도 있습니다. 마법사 그래프 위로 마우스를 움직이면 마우스 포인터가 손 모양으로 표시되어, 이를 통해 피크를 선택할 수 있습니다.

마법사 그래프에서 활성 피크 선택



피크에 피팅할 함수 변경

선택한 피크에 피팅할 함수를 변경하려면 **Change Function** 드롭다운 리스트에서 새 함수를 선택합니다. 새 함수를 선택하면 선택한 함수가 반영되도록 **Peak Edit Control** 그룹 아래의 뷰 박스가 업데이트됩니다. 이 대화 상자의 선택 사항은 전체 데이터 집합이 아닌 선택한 피크에만 적용됩니다.

사용 가능한 함수에 대한 자세한 내용은 "피크 및 기저선 함수 참조"를 참조하십시오.

초기 매개변수 값 최적화

이 마법사의 피크 편집 뷰 박스에는 다음이 포함됩니다.



- 1) 활성 피크 데이터: 검은색 심볼.
- 2) 전체 데이터 집합의 이론적 곡선: 빨간색 선.
- 3) 선택한 (각) 피크의 이론적 곡선: 녹색 선.
- 4) 선택한 피크에 해당하는 이론적 곡선의 높이, 폭, 중간 점을 조정하는 컨트롤.

선택한 피크의 이론적 곡선은 지정한 피크 함수와 기본 매개변수 값에 따라 결정됩니다. 빨간 십자선 중 하나를 원하는 위치로 끌어가거나(높이와 중간 점), 뷰 박스에 있는 이론적 곡선의 크기 조정 핸들을 끌어 가는(커브의 폭) 방법으로 이론적 곡선의 높이, 폭, 중간 점을 변경할 수 있습니다. 이 뷰 박스를 사용해서 이론적


곡선의 크기를 조정하면 초기 매개변수 값이 변경됩니다. 뷰 박스 아래에 있는 **Update Graph When Params. Change** 체크 박스를 선택하면 변경 내용이 마법사 그래프에 바로 표시됩니다. 이 체크 박스를 지우면 뷰 박스 아래에 있는 **Redraw** 버튼을 클릭할 때 마법사 그래프가 업데이트됩니다.

주의: 피크 매개변수에 대한 보다 상세한 설명은 70 페이지의 "매개변수 고정 및 공유와 제한 설정"을 참조하십시오.

각 매개변수를 영역, 높이, 또는 폭으로 명확하게 매핑할 수 없는 경우에는 피크 편집 뷰 박스를 조심스럽게 다루어야 합니다. 높이와 중간 점이 원하는 값 근처가 유지되도록 주의하면서, 폭을 먼저 설정해야 합니다. 다음으로, 필요할 때마다 폭을 조금씩 수정하여 원래 설정한 값으로 복원하면서 높이를 설정해야 합니다. 중간 점은 마지막에 설정해야 합니다. 이론적 곡선과 피크 데이터 사이의 작은 차이가 피팅 단계에 영향을 주지는 않습니다. 초기화는 좋은 피팅 결과를 얻기에 충분할 정도로 *가깝기만* 하면 됩니다. 또한, ECS 등의 일부 함수에서는 피크 편집 뷰 박스가 높이, 중간 점 또는 폭에 정확하게 일치하지는 않지만, 이 값들을 변경할 때 사용할 수 있다는 점에 주의하십시오. 보통 *정확한* 피팅은 필요 없습니다. 대부분의 경우, 피크 데이터와 이론적 곡선이 적절한 수준으로 겹치는 정도면 좋은 피팅 결과를 얻기에 충분합니다.

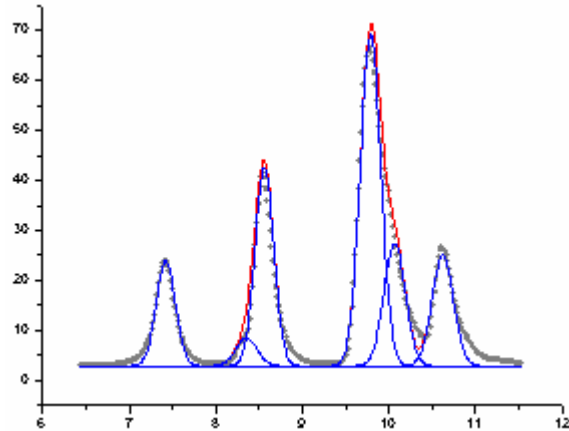
뷰 박스에서 X 축 스케일 범위를 확장하려면  버튼을 클릭합니다. 뷰 박스의 X 축 스케일 범위를 축소하려면  버튼을 클릭합니다. 그러면, 뷰 박스의 X 축 스케일에만 영향을 줍니다. 마법사 그래프의 매개변수 값이나 축 스케일에는 영향을 주지 않습니다.

피크 편집 뷰 박스를 사용해서 피크의 매개변수 값을 미세 조정하면 마법사 그래프의 각 피크에 해당하는 이론적 곡선이 어떤 영향을 받게 되는지 확인할 수 있습니다. 각 피크의 이론적 곡선을 표시하려면 마법사 그래프 아래에 있는 **Individual Peaks**


버튼  을 클릭합니다.

주의: 마법사 그래프의 각 피크에 표시된 이론적 곡선은 **Results** 마법사 페이지에서 액세스할 수 있는 그래프 보고서에도 포함됩니다.

마법사 그래프의 각 피크에 대한 이론적 곡선 표시



뷰 박스에서 이론적 곡선의 높이, 폭, 중간 점을 조정하는 동안 피크를 확대하면 마법사 그래프의 변화를 보다 쉽게 확인할 수


있습니다. 그러려면, 마법사 그래프 아래의 **Enlarger** 버튼  을 클릭한 후 마법사 그래프의 피크 주위에서 직 사각형 부분을 드래깅합니다. X 축을 스크롤하고 전체 축 스케일로 복원하는 버튼도 사용할 수 있습니다. 이 버튼에 관한 자세한 설명은 64 페이지의 "피크 추가, 수정 및 삭제"를 참조하십시오.

피크 편집 뷰 박스를 편집하는 동안 마법사 그래프 업데이트

피크 편집 뷰 박스에 변경 사항이 있을 때마다 마법사 그래프를 업데이트하려면 **Update Graph when Params. Change** 체크 박스를 선택합니다. 이 체크 박스를 지운 경우, **Redraw** 버튼을 클릭하여 마법사 그래프에 변경 사항을 표시합니다.

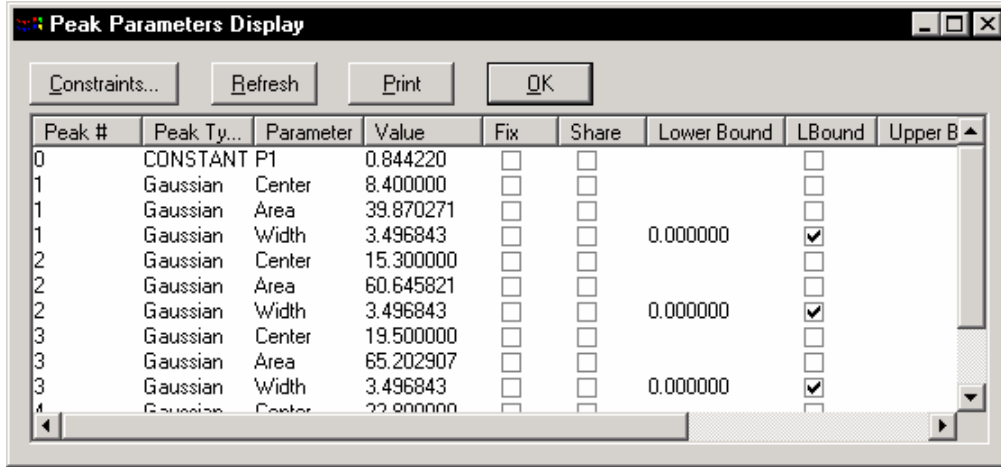
매개변수 고정 및 공유와 제한 설정

Peak Parameters Display 대화 상자(마법사 그래프 아래의

Parameter Display 버튼  을 클릭하여 액세스)를 사용하면, 매개변수 값을 고정하고, 피크 사이에서 매개변수를 공유하며, 상한

및 하한과 일반 선형 제한을 포함하는 매개변수 제한을 설정할 수 있습니다. 피크에 피팅할 다른 함수를 선택하고 매개변수 값을 편집할 수도 있습니다.

Peak Parameters Display 대화 상자



피크 함수 변경

선택한 피크에 피팅할 함수를 변경하려면 **Peak Type** 열에서 현재 함수를 더블 클릭합니다. 이 작업을 수행하면 사용 가능한 피크 함수가 표시된 드롭 다운 리스트가 열립니다. 드롭-다운 리스트에서 새 함수를 선택합니다.

매개변수 값 편집

매개변수를 미리 설정한 값으로 초기화하려면 **Value** 열에서 현재 매개변수 값을 더블 클릭한 후 원하는 값을 입력합니다.

매개변수를 이전 설정으로 되돌리려면 **Refresh** 버튼을 클릭합니다.

매개변수 값 고정 또는 변화 허용

반복 절차를 수행하는 동안 매개변수가 변화하는 것을 방지하려면 매개변수의 **Fix** 체크 박스를 선택합니다.

주의: 피크 데이터에 피크 수가 많은 경우나 기저선이 복잡한데 피크 데이터에서 기저선을 빼지 않은 경우에는 피팅 전에 기저선 매개변수를 고정하는 것이 좋습니다. 그렇지 않으면, 피팅 중에 기저선에 근접한 작은 피크 때문에 기저선이 빗나갈 수 있습니다.

피크 사이의 매개변수 공유

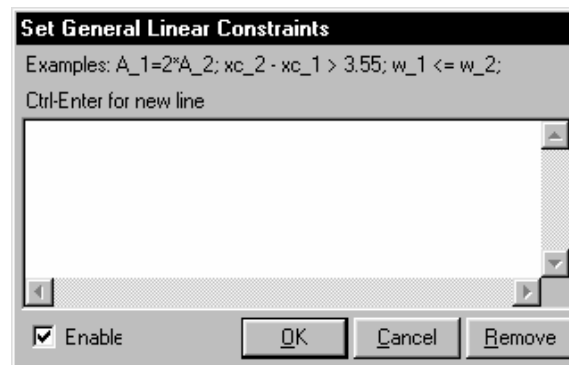
피크 사이에서 매개변수 값을 공유하려면(예를 들어, Width 매개변수) 공유할 각 매개변수의 **Share** 체크 박스를 선택합니다. 예를 들어, 데이터 그림의 피크 2와 4 사이에서 Width 매개변수를 공유하려면 피크 2와 피크 4 모두의 Width 매개변수에서 **Share** 체크 박스를 선택합니다. 피크 사이에서 매개변수를 공유하면 지정된 피크의 공통된 버전 한 가지만 표시됩니다.

매개변수에 제한 설정

매개변수에 상한 및 하한과 같은 단순 제한을 설정할 수 있습니다. 제한을 설정하려면 해당 매개변수의 **LBound** 또는 **UBound** 체크 박스를 선택합니다. 그리고, 현재 **Lower Bound** 또는 **Upper Bound** 값을 더블 클릭한 후 원하는 제한 값을 입력합니다.

상한과 하한 외에도 일반 선형 제한을 설정할 수 있습니다. 그러려면 **Peak Parameters Display** 대화 상자에서 **Constraints** 버튼을 클릭합니다. 그러면, **Set General Linear Constraints** 대화 상자가 열립니다.

일반 선형 제한 설정



제공된 텍스트 박스에 제한을 입력합니다. 제한이 두 개 이상 있는 경우에는 각각을 세미콜론(;)으로 분리합니다. 여러 행에 제한을 입력하려면 **CTRL+ENTER**를 누른 채 커서를 다음 행으로 이동합니다.

제한을 입력할 때에는 다음과 같은 표기법을 사용해서 매개변수를 지정해야 합니다.

ParameterName_PeakNumber

내장 함수의 경우에는 *ParameterName* 이 Select Fitting Function 대화 상자의 Function Parameters 리스트 박스에 표시됩니다(Peak Finding 마법사 페이지에서 Set/Modify 클릭). 또는, 매개변수 이름이 "피크 및 기저선 함수 참조"의 각 내장 함수별로 표시됩니다. 사용자 정의 함수의 경우 *ParameterName* 은 Define New Peak Function 대화 상자에서 지정합니다.

PeakNumber 는 Peak Parameters Display 대화 상자의 Peak # 열에 표시되는 값입니다.

예를 들어, 피크 5 번이 Gaussian 함수로 설정되면 중간 점, 영역, 폭의 매개변수 이름은 **xc_5, A_5, w_5** 가 됩니다.

제한을 입력할 때에는 다섯 가지 관계형 연산자가 지원됩니다. =, <, <=, >, and >=. 하지만 Peak Fitting 마법사는 <을 <=로 취급합니다. 마찬가지로, Peak Fitting 마법사는 >도 >=로 취급합니다.

제한에 대한 예제: Gaussian 피크 2 번의 중간 점과 Gaussian 피크 1 번의 중간 점 사이 거리를 25 로 제한하려면, 텍스트 박스에서 **xc_2 - xc_1 <= 25** 를 입력합니다.

주의: **Enable** 체크 박스를 지우면 지정한 선형 제한을 일시적으로 비활성화해 둘 수 있습니다. 제한은 이 체크 박스를 선택한 경우에만 적용됩니다.

피팅 절차 제어 및 피팅 수행

Fit 마법사 페이지를 사용하면 피팅 절차를 제어하고 피팅을 수행할 수 있습니다.

Fit 마법사 페이지 컨트롤

System Settings

Iterations: 10

Tolerance: 0.05

Confidence: 0.95

Prediction: 0.95

Fix Baseline Parameters: ☐

Weighting Method

no weight

reduced Chi-Square:
0.01046
Fit has converged
Iterations performed: 4

Reset Fit

반복 횟수 설정


Fit 버튼을 클릭했을 때 수행할 0Levenberg-Marquardt 반복의 최대 반복 횟수(n)를 지정합니다. 반복 작업을 n 번 수행하기 전에 허용 범위에 도달하거나 오류가 발생하면 n 번 미만의 반복 작업이 수행됩니다. 실제로 반복 작업을 수행한 횟수는 출력 뷰 박스(Weighting Method 그룹 아래)에 표시됩니다.


허용 범위 설정

Fit 버튼을 클릭하면 Peak Fitting 마법사는 최대 n 번의 Levenberg-Marquardt 축소 카이제곱 반복 작업을 수행합니다. 여기서 n 은 Iterations 값입니다. 연속적인 두 번의 반복 작업에서 축소 카이제곱 값의 변화가 Tolerance 값보다 적은 경우에는 반복 작업이 더 이상 수행되지 않습니다.

신뢰 수준 및 예측 밴드 수준 설정

신뢰 수준 및 예측 밴드에 대해 원하는 신뢰 수준을 관련 텍스트 박스에서 지정합니다. 신뢰대와 예측 밴드를 표시하려면 마법사

그래프 아래에 있는 **Confidence Bands** 버튼  과 **Prediction**

Bands 버튼  을 클릭합니다. 표시를 끄려면 해당 버튼을 다시 클릭합니다.

주의: 마법사 그래프 표시되는 신뢰대와 예측 밴드는 **Results** 마법사 페이지에서 액세스할 수 있는 그래프 보고서에도 포함됩니다.


신뢰 구간은 특정 X 값에서 피팅 곡선의 값을 얼마나 잘 예상했는가를 나타냅니다. 피팅 곡선의 정확한 값이 신뢰 구간 내에 있을 것을 $100 \cdot a\%$ 신뢰한다고 말할 수 있으며, 여기서 a 는 원하는 신뢰 대입입니다. (피팅 후에 매개변수에 관한 신뢰 구간을 보고하려면 79 페이지의 “피팅 함수 매개변수 및 피팅 통계 보고” 를 참조하십시오.)

예측 구간이란 일련의 반복 측정에서 얻은 모든 실험 점의 $100 \cdot a\%$ 가 특정 X 값에서 들어갈 것으로 예상되는 구간이며, 여기서 a 는 예측 수준을 나타냅니다.

기저선 변화 또는 고정

피크 데이터에 피크 수가 많은 경우나 기저선이 복잡한데 피크 데이터에서 기저선을 빼지 않은 경우에는 피팅 전에 기저선 매개변수를 고정하는 것이 좋습니다. 그러지 않으면, 피팅 중에 기저선에 근접한 작은 피크 때문에 기저선이 빗나갈 수 있습니다.

Fit 마법사 페이지에서 **Fix Baseline Parameters** 체크 박스를 선택하거나 **Peak Parameters Display** 대화 상자(Parameter

Display 버튼  을 클릭하여 액세스)에서 기저선 매개변수의 **Fix** 체크 박스를 선택하면 기저선 매개변수를 고정할 수 있습니다.

데이터 가중 처리

Peak Fitting 마법사를 사용하면 반복 프로세스 중에 축소 카이제곱 값을 계산할 때 서로 다른 데이터 점의 가중 처리 방법을 지정할 수 있습니다. 사용할 수 있는 가중 처리 방법은 다음과 같습니다.

1) No weight. 각 데이터 점의 가중치 = $w_i = 1$. 제곱의 합 =

$$\sum (y_i - f_i)^2.$$

2) Statistical. 각 데이터 점의 가중치 = $w_i = 1/y_i^{1/2}$. 제곱의 합 =

$$\sum |(y_i - f_i)^2 / y_i|.$$

3) Instrumental. 이 옵션은 피크 데이터를 포함한 워크시트에 Y 오류 열이 있는 경우에만 사용할 수 있습니다. 각 데이터 점의 가중치 = $w_i = 1/\sigma_i$. 여기서 σ_i 는 선택한 오류 데이터 집합에 지정된 각 데이터 집합의 오류 크기입니다. 제곱의 합 =


$$\sum [(y_i - f_i)/\sigma_i]^2.$$

4) Specified Dataset. 이 옵션은 피크 데이터를 포함하는 워크시트에 Y 오류 열이 있는 경우에만 사용할 수 있습니다. 각 데이터 점의 가중치 = $w_i = 1/d_i$. 여기서 d_i 는 각 데이터 점에 지정된 데이터 집합 값입니다. 제곱의 합 = $\sum [(y_i - f_i)/d_i]^2$.

피팅 시작하기


Number of Iterations 드롭 다운 리스트(및 Tolerance 텍스트 박스)에서 지정한 것과 같이 최대 n 번의 Levenberg-Marquardt 반복 작업을 수행하려면 Fit 버튼을 클릭합니다. Number of Iterations 드롭 다운 리스트와 Tolerance 텍스트 박스 값 사이의 관계에 관한 내용은 74 페이지의 "허용 범위 설정"을 참조하십시오.

Levenberg-Marquardt 반복 작업을 수행하고 나면 축소 카이제곱 값과 실제 반복 횟수가 Output 뷰 박스에 표시됩니다. 업데이트된

매개변수 값을 보려면 Parameter Display 버튼  을 클릭하여 Peak Parameters Display 대화 상자를 엽니다.

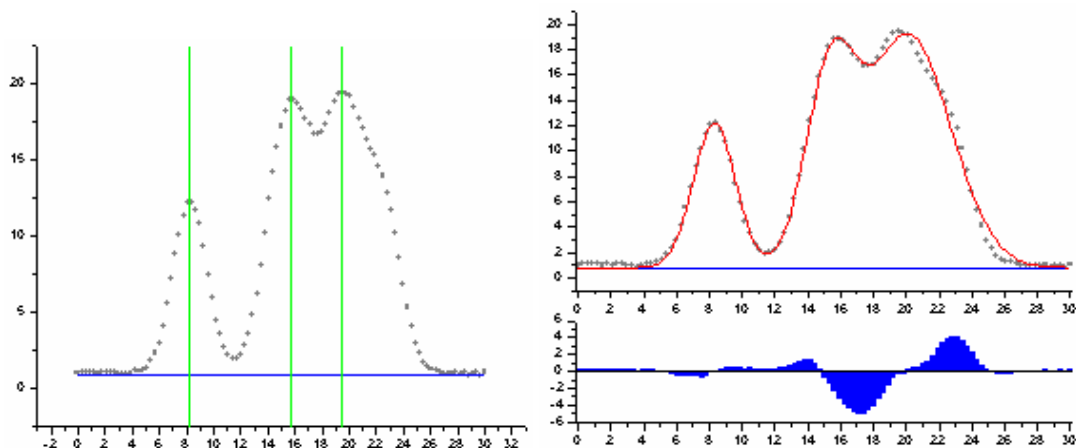
주의: 이 페이지를 처음 활성화할 때의 값으로 매개변수를 재설정하려면 Reset 버튼을 클릭합니다.

잔류 값 검토를 통한 피팅 확인

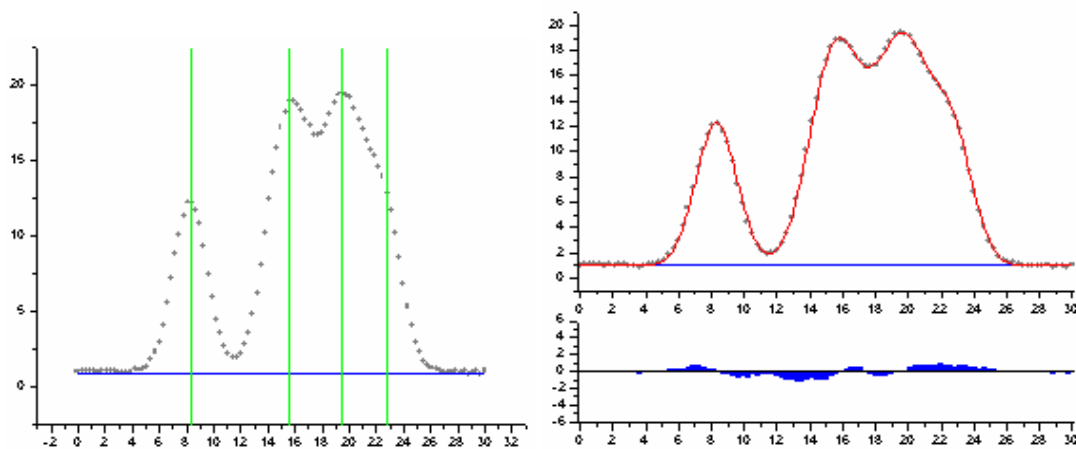
피팅을 수행한 후에는 마법사 그래프 아래의 Residuals 버튼  을 클릭하여 잔류 그림을 검토할 수 있습니다. 잔류 그림은 피팅

곡선과 실제 데이터 점 사이의 차이를 나타냅니다. 피크로 표시되지 않은 숨겨진 피크는 보통 잔류 그림에서 피크로 표시됩니다. 다음 그림에서는 잔류 그림을 사용하여 숨겨진 피크를 확인하는 작업을 설명합니다.

숨겨진 피크 및 잔류 값(표시되지 않음)



숨겨진 피크 및 잔류 값(표시됨)



잔류 값을 검토하여 숨겨진 피크를 찾으려면 **Define Peaks** 마법사 페이지로 돌아가서 숨겨진 피크에 해당하는 피크 마커를 추가합니다. 그리고 **Peak Edit Control** 페이지로 가서 피크 편집 뷰

박스를 사용하여 매개변수 값을 조정합니다. 마지막으로 **Fit** 페이지로 돌아가서 추가 피팅 반복 작업을 수행합니다.

결과 보고

Results 마법사 페이지를 사용하면 피팅 함수 매개변수, 피팅 통계, 피크 특성에 관한 보고서를 만들 수 있습니다. 워크시트와 그래프 보고서를 모두 사용할 수 있습니다. 현재 피크 위치를 **ASCII** 파일에 저장해 두었다가 비슷한 데이터 집합을 분석할 때 피크 위치 초기화에 사용할 수도 있습니다. 피크 및 기저선 특성과 보고서 설정을 초기화 파일에 저장해 두었다가 다시 사용할 수도 있습니다.

Results 마법사 페이지 컨트롤

The screenshot shows the 'Results Wizard' interface with the following sections and controls:

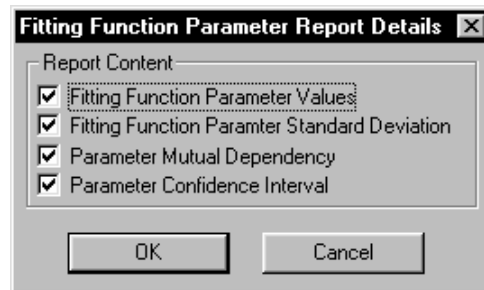
- Peak Characterization Report**: Contains buttons for 'Plot', 'Options', 'Worksheet', and 'Options'.
- Fitting Function Parameters**: Contains buttons for 'Worksheet' and 'Options'.
- Initialization File**: Contains a 'Save' button.
- Peak Centers and Heights**: Contains a 'Save' button.
- Peak Properties**: Contains a 'View' button.
- Save Procedure File**: A checkbox at the bottom.

피팅 함수 매개변수 및 피팅 통계 보고

워크시트에 저장할 매개변수 값의 세부 정보를 선택하려면 **Results** 마법사 페이지의 **Fitting Function Parameters** 그룹에서 **Options**

버튼을 클릭합니다. 그러면, Fitting Function Parameter Report Details 대화 상자가 엽니다.

Fitting Function Parameter Report Details 대화 상자



피팅 함수 매개변수 외에도 다음을 선택하여 보고할 수 있습니다.

- 1) 매개변수 값의 표준 오류.
- 2) 매개변수의 의존성.
- 3) 매개변수 신뢰 구간.

보고할 매개변수 세부 정보를 선택한 후, OK 버튼을 클릭합니다. 이 매개변수 세부 정보를 **Param n** 이라는 이름의 워크시트에 저장하려면 **Fitting Function Parameters** 그룹에서 **Worksheet** 버튼을 클릭합니다. **Peak Fitting** 마법사는 **Origin** 프로젝트에서 새 **Param** 워크시트를 만들 때마다 n 씩 증가합니다. **Peak Fitting** 마법사는 활성 상태를 유지하기 때문에 **Worksheet** 버튼을 클릭한 후에는 **Param** 워크시트가 보이지 않습니다. 워크시트를 보려면 마법사를 최소화하거나 닫습니다(닫기 전에, 91 페이지의 "초기화 파일에 설정 저장"과 92 페이지의 "사용자 정의 마법사 만들기"에서 검토한 마법사 초기화 및 절차 파일 개념을 검토합니다). **Param** 워크시트에서 만든 마지막 결과 워크시트인 경우에는 이 워크시트가 활성화됩니다. 그렇지 않은 경우, 프로젝트 탐색기나 **Window** 메뉴의 워크 스페이스에서 활성화할 수 있습니다.

Param 워크시트

	Function	ParaName	Value	Error	Conflntvl	Depend
1	CONSTANT	Y0	0.84422	0	0	0
2	Gaussian	xc 1	8.29385	0.00781	0.01104	0.00673
3		A 1	36.39021	0.19412	0.27453	0.34198
4		w 1	2.99374	0.01854	0.02622	0.34891
5	Gaussian	xc 2	15.50984	0.03923	0.05547	0.97794
6		A 2	64.98474	1.82792	2.58507	0.99099
7		w 2	3.63365	0.04705	0.06653	0.94331
8	Gaussian	xc 3	19.64178	0.03737	0.05285	0.97526
9		A 3	78.95766	4.26044	6.02517	0.9981
10		w 3	4.16221	0.18697	0.26441	0.99635
11	Gaussian	xc 4	22.79808	0.06581	0.09307	0.97523
12		A 4	25.95268	2.64496	3.74054	0.99658
13		w 4	2.8921	0.07976	0.1128	0.93766
14	SS		1.63225	—	—	—
15	ChiSqr		0.01834	—	—	—
16	COD		0.99966	—	—	—
17	Correlation		0.99983	—	—	—
18	DOF		89	—	—	—
19	NPoints		101	—	—	—
20	Confidence		0.95	—	—	—
21	Tolerance		0.03	—	—	—

Param 워크시트는 각 피크에 대해 다음을 보고합니다.

- 1) 매개변수 이름.
- 2) 피팅 프로세스에서 얻은 매개변수 값.
- 3) 매개변수 값의 표준 오류.
- 4) 신뢰 구간. 이 값의 계산은 주어진 신뢰 수준에 해당하는 표준 오류와 표준 정규 분포의 중요 값을 사용하는 큰 모집단에서의 추정을 바탕으로 수행됩니다.
- 5) 매개변수의 의존성(1에 가까운 값은 의존성이 큰 상태, 즉 매개변수 과다를 나타냅니다).

또한, Param 워크시트는 다음을 보고합니다.

- 1) SS: 데이터와 피팅 사이의 차이를 제공한 값의 합.

$$S(P) = \sum_{i=1}^{i^{end}} w_i (f_i - y_i)^2$$

여기서 f_i 는 데이터 점 i 에 대해 평가한 함수 값, w_i 는 가중치이며 i 는 i^{step} 씩 증가합니다. PFM은 Levenberg-Marquardt 알고리즘을 수행하여 $S(P)$ 를 최소화하는 매개변수 P 를 찾습니다. 가중치 w_i 는 데이터 점 i 에서의 기여도를 나타냅니다. 보다 상세한 설명은 74 페이지의 "피팅 절차 제어 및 피팅 수행"을 참조하십시오.

2) 축소 카이제곱 값: 피팅의 축소 카이제곱 값.

$$\chi^2(P) = \frac{S(P)}{d} = \frac{S(P)}{n^{eff} - p}$$

여기서 $S(P)$ 는 제곱의 합 값이고(항목 1 참조), P 는 매개변수 벡터, d 는 자유도, n 은 피팅에 사용된 데이터 점의 수, p 는 피팅에서 변화하는 매개변수의 수입니다.

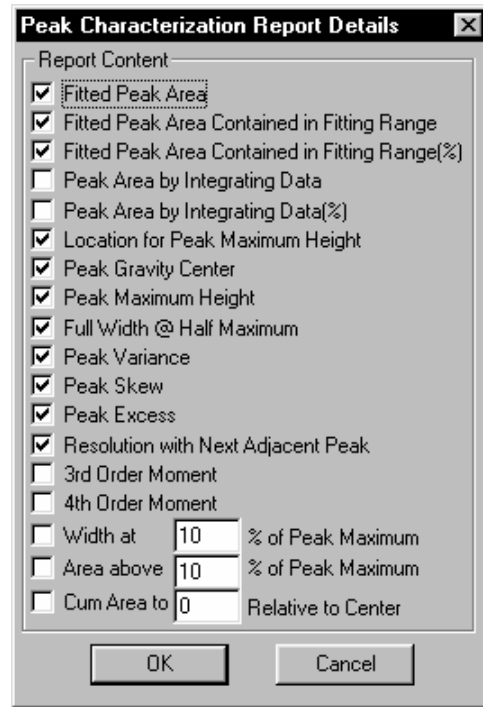
- 3) COD: 결정계수(R^2).
- 4) Correlation: 상관 계수 (R).
- 5) DOF: 고려한 데이터 점의 수에서 부동 매개변수(고정되지 않은 매개변수)의 수를 뺀 값에 해당하는 자유도의 수.
- 6) NPoints: 피팅 프로세스에서 고려하는 데이터 점의 수.
- 7) Confidence: 예측 밴드 계산에 사용되는 신뢰 수준.
- 8) Tolerance: 반복 작업이 중단되는 허용 범위 값.

워크시트 보고서에서 피크 특성 보고

피크 특정 보고서는 워크시트 또는 그래프 형태로 생성할 수 있습니다. 두 보고서를 모두 **Results** 마법사 페이지의 **Peak Characterization Report** 그룹에서 사용할 수 있습니다.

워크시트 보고서를 만들려면 먼저 **Peak Characterization Report** 그룹의 **Worksheet** 버튼 오른쪽에 있는 **Options** 버튼을 클릭합니다. 그러면, **Peak Characterization Report Details** 대화 상자가 열립니다.

Peak Characterization Report Details 대화 상자



보고서에 피크 특성을 포함하려면 관련 체크 박스를 선택합니다. 다음과 같은 피크 특성을 사용할 수 있습니다. 선택하면 피크 데이터에 있는 각 피크에 대한 피크 특성이 보고됩니다.

1) 피팅된 피크 영역. 피팅을 통해 얻은 매개변수 값을 사용한 적분을 통해 피크 함수와 기저선 사이의 영역을 구합니다. $-\infty$ 에서 $+\infty$ 까지 적분을 수행합니다. (ReportWks 워크시트에서 이 열의 이름은 **AreaFit**입니다.)

2) 피팅 범위에 포함된, 피팅된 피크 영역. 피팅을 통해 얻은 매개변수 값을 사용한 적분을 통해 피크 함수와 기저선 사이의 영역을 구합니다. 적분은 데이터 범위 내에서만 수행합니다. (ReportWks 워크시트에서 이 열의 이름은 **AreaFitT**입니다.)

3) 피팅 범위(%)에 포함된, 피팅된 피크 영역. 피팅을 통해 얻은 매개변수 값을 사용한 적분을 통해 피크 함수와 기저선 사이의 영역을 구합니다. 적분은 데이터 범위 내에서만 수행합니다. 결과는 전체 영역에서 차지하는 백분율로 표시됩니다. (ReportWks 워크시트에서 이 열의 이름은 **AreaFitTP**입니다.)

4) 데이터 적분으로 얻은 피크 영역. 적분을 통해 피크 데이터와 기저선 사이의 영역을 구합니다. 적분은 데이터 범위 내에서만

수행합니다. (ReportWks 워크시트에서 이 열의 이름은 **Arealntg** 입니다.)

5) 데이터 적분으로 얻은 피크 영역(%). 적분을 통해 피크 데이터와 기저선 사이의 영역을 구합니다. 적분은 데이터 범위 내에서만 수행합니다. 결과는 전체 영역에서 차지하는 백분율로 표시됩니다. (ReportWks 워크시트에서 이 열의 이름은 **ArealntgP** 입니다.)

6) 피크 최대 높이의 위치. 피크 최대값에 해당하는 X 값입니다. (ReportWks 워크시트에서 이 열의 이름은 **CenterMax** 입니다.)

7) 피크 무게 중심. 피크 무게 중심(m_1')에 해당하는 X 값입니다. 항목 14 를 참조하십시오. (ReportWks 워크시트에서 이 열의 이름은 **CenterGrvty** 입니다.)

8) 피크 최대 높이. 피크 최대값에 해당하는 Y 값입니다. (ReportWks 워크시트에서 이 열의 이름은 **MaxHeight** 입니다.)

9) 최대값 절반에서의 전체 폭. 피크 최대값의 절반에 해당하는 위치의 피크 폭입니다. (ReportWks 워크시트에서 이 열의 이름은 **FWHM** 입니다.)

10) 피크 분산. 이차 모멘트(m_2)에 해당하는 데이터 분산 값입니다. 항목 14 를 참조하십시오. (ReportWks 워크시트에서 이 열의 이름은 **Variance** 입니다.)

11) 피크 스큐잉. 피크의 비대칭 정도를 나타내는 Fisher 스큐잉

값입니다. $S = \frac{m_3}{\sqrt{m_2^3}}$ (ReportWks 워크시트에서 이 열의 이름은

Skew 입니다.)

12) 피크 익세스. 같은 평균과 분산을 가진 정규 또는 Gaussian 분포에 비해 피크가 높이 솟은 정도를 나타내는 Fisher kurtosis

값입니다. $E = \frac{m_4}{m_2^2} - 3$ (ReportWks 워크시트에서 이 열의 이름은

Excess 입니다.)

13) 인접한 다음 피크와의 분해 값. $R_s = \frac{X_{c2} - X_{c1}}{0.5 \cdot (w_2 + w_1)}$, 여기서

X_{c1} 과 X_{c2} 는 피크 중간 값이고, w_1 과 w_2 는 구성된 기저 폭입니다. (ReportWks 워크시트에서 이 열의 이름은 **Resolution** 입니다.)

14) 피크 모멘트. (ReportWks 워크시트에서 이 열의 이름은 **Moment3** 과 **Moment4** 입니다.)

$$m_0 = \int_0^{\infty} F(x)dx \text{ (0 번째 모멘트 또는 피크 영역)}$$

$$m_n' = \frac{1}{m_0} \int_0^{\infty} F(x)x^n dx \text{ 여기서 } n \geq 1 \text{ (n 번째 영점 모멘트)}$$

$$m_n = \frac{1}{m_0} \int_0^{\infty} F(x)(x - m_1')^n dx \text{ 여기서 } n \geq 2 \text{ (n 번째 중간 모멘트)}$$

15) 피크 최대값의 $n\%$ 에 해당하는 폭. 피크 최대값의 $n\%$ 에 해당하는 피크 폭. (ReportWks 워크시트에서 이 열의 이름은 **WidthAtP** 입니다.)

16) 피크 최대값의 $n\%$ 위 영역. 피크 최대값의 $n\%$ 위에 해당하는 피크 영역. (ReportWks 워크시트에서 이 열의 이름은 **AreaAbove** 입니다.)

17) 중간 점에 대한 X_r 까지의 누적 영역. 누적 피팅 영역은 $-\infty$ 에서 X 까지입니다. 여기서 X 는 피크 중간 점에 대해 상대적으로 지정한 값입니다. (ReportWks 워크시트에서 이 열의 이름은 **CumArea** 입니다.)



선택을 완료하고 OK 버튼을 클릭한 다음, **Peak Characterization Report** 그룹에서 **Worksheet** 버튼을 클릭하여 피크 특성 워크시트 보고서를 만듭니다. **Peak Fitting** 마법사는 **ReportWksn** 워크시트를 만듭니다. 마법사는 **Origin** 프로젝트에서 새 **ReportWks** 워크시트를 만들 때마다 n 씩 증가합니다. 마법사는 활성 상태를 유지하기 때문에 **Worksheet** 버튼을 클릭하고 나면 **ReportWks** 워크시트가 보이지 않습니다. 워크시트를 보려면 마법사를 최소화하거나 닫습니다(닫기 전에, 91 페이지의 "초기화 파일에 설정 저장"과 92 페이지의 "사용자 정의 마법사 만들기"에서 검토한 초기화 및 절차 파일 개념을 검토합니다). **ReportWks** 워크시트가 만든 마지막 결과 워크시트인 경우에는 이 워크시트가 활성화됩니다. 그렇지 않은 경우에는 프로젝트 탐색기나 **Window** 메뉴의 워크 스페이스에서 활성화할 수 있습니다.


ReportWks 워크시트

	PeakNum	PeakType	AreaFit[Y]	AreaFitT[Y]	AreaFitTP[Y]	CenterMax[Y]
1	1	Gaussian	0.12996	0.12996	17.10025	11501.47056
2	2	Gaussian	0.10989	0.10989	14.45982	12094.38312
3	3	Gaussian	0.25679	0.25679	33.78902	12435.63504
4	4	Gaussian	0.13092	0.13092	17.22628	12720.25571
5	5	Gaussian	0.13242	0.13242	17.42463	13376.86037

그래프 보고서에서 피크 특성 보고

피크 특성 결과를 워크시트로 보고하는 것 외에, 그래프 보고서를 만들 수도 있습니다. 그래프 보고서를 만들면 보고서에는 피크 데이터, 기저선, 피팅 곡선이 표시된 그래프 레이어가 포함됩니다. 그리고, 마법사 그래프에서 각 피크의 신뢰대, 예측 밴드, 피팅 곡선의 표시를 활성화한 경우에는 보고서 그래프 레이어에 이 피팅 결과도 표시됩니다. 마법사 그래프에서 신뢰대 또는 예측 밴드의 표시를 활성화하려면 마법사 그래프 아래에 있는 **Confidence**

Bands 버튼 과 **Prediction Bands** 버튼 을 클릭합니다. 각 피크의 피팅 곡선 표시를 활성화하려면 **Individual Peaks**

버튼 을 클릭합니다.

그래프 보고서를 만들려면 먼저 **Peak Characterization Report** 그룹에서 **Plot** 버튼의 오른쪽에 있는 **Option** 버튼을 클릭합니다. 그러면, **Peak Characterization Report Details** 대화 상자가 열립니다.

Peak Characterization Report Field Details 대화 상자

그래프 보고서는 워크시트 보고서와 동일한 옵션을 제공하지만, 워크시트 보고서에는 없는 피크 번호 및 함수 유형 표시 옵션이 포함되어 있습니다. 이 피팅 결과는 그래프 보고서에서 피팅된 데이터 그림 아래에 표시됩니다.

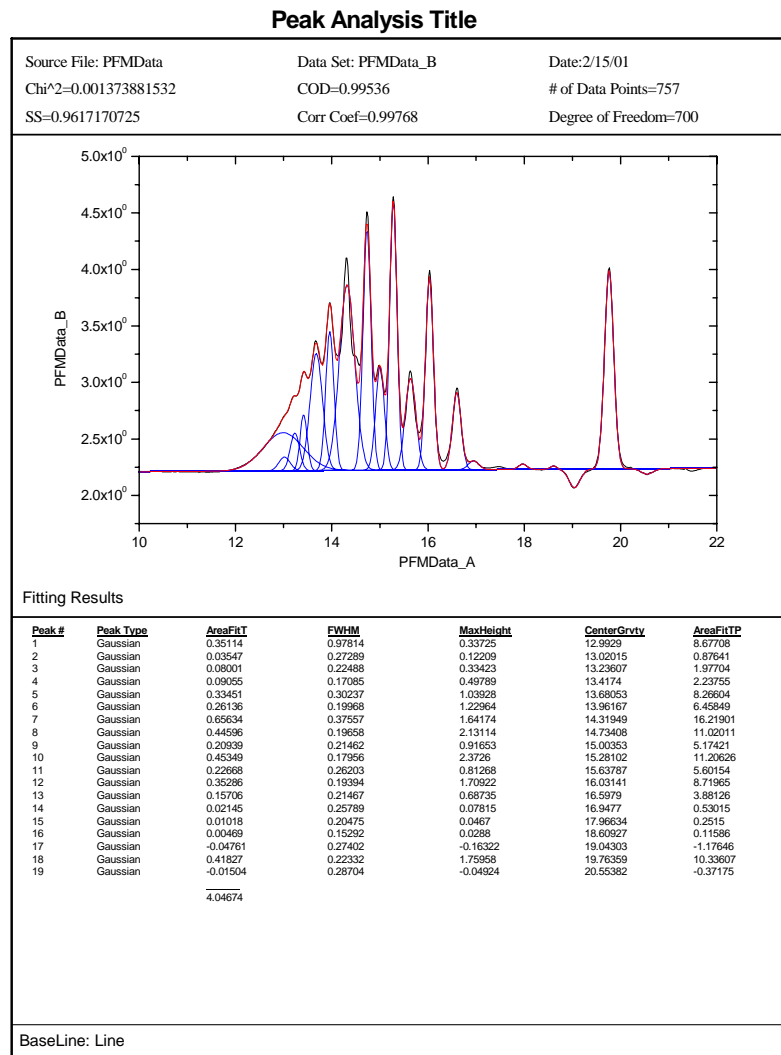
이 대화 상자를 편집하려면 먼저 **Total Number of Fields** 조합 박스에서 값을 선택 또는 입력하여 그래프 보고서에 표시할 필드의 수를 선택합니다. 일단 보고서 필드를 선택한 후에도 이 조합 박스를 수정할 수 있다는 점에 주의하십시오.

Total Number of Fields 조합 박스를 사용자 정의하고 나면 지정된 필드 수가 표시되도록 **Available Fields on Report Plot**의 값이 업데이트됩니다. 필드에 피크 특성을 할당하려면 **Available Fields on Report Plot** 리스트 박스에서 필드를 선택한 후 **Available Results for Display** 그룹에서 원하는 피크 특성을 선택합니다. 사용 가능한 피크 특성에 관한 설명은 82 페이지의 "워크시트 보고서에서 피크 특성 보고"를 참조하십시오.

Available Results for Display 그룹에서 피크 특성을 선택하고 나면 **Current Field Title** 텍스트 박스에 피크 특성에 해당하는 기본 그래프 보고서 제목이 표시됩니다. 필요하다면, 제목을 편집합니다.

선택을 완료하고 **OK** 버튼을 클릭한 다음, **Peak Characterization Report** 그룹에서 **Plot** 버튼을 클릭하여 피크 특성 그래프 보고서를 만듭니다. **Peak Fitting** 마법사를 사용하여 **ReportPlot n** 그래프를 만듭니다. 마법사는 **Origin** 프로젝트에서 새 **ReportPlot** 그래프를 만들 때마다 n 씩 증가합니다. 마법사는 활성 상태를 유지하기 때문에 **Plot** 버튼을 클릭하고 나면 **ReportPlot** 그래프가 보이지 않습니다. 그래프를 보려면 마법사를 최소화하거나 닫습니다(닫기 전에, 91 페이지의 "초기화 파일에 설정 저장"과 92 페이지의 "사용자 정의 마법사 만들기"에서 검토한 초기화 및 절차 파일 개념을 검토합니다). **ReportPlot** 그래프가 만든 마지막 결과 그래프인 경우에는 이 그래프가 활성화됩니다. 그렇지 않은 경우에는 프로젝트 탐색기나 **Window** 메뉴의 워크 스페이스에서 활성화할 수 있습니다.

ReportPlot 그래프



Peak Characterization Report Field Details 대화 상자에서 지정한 피크 특성 외에도, the ReportPlot 그래프에는 다음과 같은 피팅 정보와 결과가 포함됩니다.

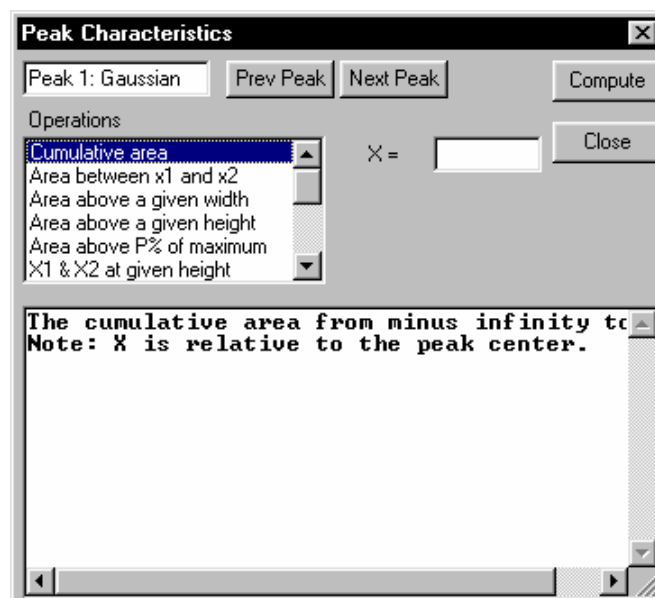
1) Source File: 피팅 데이터를 포함한 워크시트의 이름. Peak Fitting 마법사는 피팅 데이터를 포함한 PFMDData 라는 이름의 숨겨진 워크시트를 만듭니다. 같은 프로젝트에서 추가 데이터 집합을 피팅하면 마법사는 이 워크시트 이름을 증가시킵니다.

- 2) **Dataset:** Y 피팅 데이터 집합 이름. 예를 들면, **PFMDData_b**.
- 3) **Date:** 그래프 보고서를 만든 날짜.
- 4) **Chi²:** 피팅의 축소 카이제곱 값. 보다 상세한 설명은 69 페이지의 "워크시트 보고서에서 피크 특성 보고"를 참조하십시오.
- 5) **COD:** 결정계수(R^2).
- 6) **# of Data Points:** 피팅에 사용된 데이터 점의 수.
- 7) **SS:** 데이터와 피팅 차이를 제공한 값의 합. 보다 상세한 설명은 82 페이지의 "워크시트 보고서에서 피크 특성 보고"를 참조하십시오.
- 8) **Corr Coef:** 상관 계수 (R).
- 9) **Degree of Freedom:** 고려한 데이터 점의 수에서 부동 매개변수(고정되지 않은 매개변수)의 수를 뺀 값에 해당하는 자유도의 수.

피크 특성에 대한 대화형 계산 및 보기

Peak Fitting 마법사는 피크 특성을 워크시트 보고서나 그래프 보고서로 표시하는 것 외에도 일부 피크 특성을 대화 상자에서 대화형으로 표시할 수 있습니다. 그러려면 **Results** 마법사 페이지의 **Peak Properties** 그룹에서 **View** 버튼을 클릭합니다. 그러면, **Peak Characteristics** 대화 상자가 엽니다.

Peak Characteristics 대화 상자



Prev Peak 와 Next Peak 버튼을 클릭하여 원하는 피크를 선택합니다. 그리고 Operations 리스트 박스에서 원하는 피크 특성을 선택합니다. 다음과 같은 피크 특성을 계산한 다음 보려면 Compute 버튼을 클릭합니다. 필요한 경우에는 표시된 텍스트 박스에 요청 값을 입력합니다.

누적 영역: $-\infty$ 에서 X 까지의 누적 영역입니다. 주의: X 는 피크 중간 점에 대한 상대적인 값입니다.

$X1$ 과 $X2$ 사이의 영역: $X1$ 과 $X2$ 를 지나는 두 수직선 사이의 피크 스트립 영역입니다.

주어진 폭 위의 영역: 피크 상의 끝 점이 서로 W 만큼 떨어진 수평선 위의 영역입니다.

주어진 높이 위의 영역: 높이 H 에 해당하는 수평선 위의 영역입니다.

최대값의 $P\%$ 위 영역: 높이가 피크 최대값의 $P\%$ 와 같은 수평선 위의 영역입니다.

주어진 높이의 $X1$ 과 $X2$: 높이 H 에서 수평선과 만나는 왼쪽 및 오른쪽 절편 값입니다.

최대값의 $P\%$ 에서 $X1$ 과 $X2$: 피크 최대값의 $P\%$ 와 같은 높이에서 수평선과 만나는 왼쪽 및 오른쪽 절편 값입니다.

피크 분해: 두 피크 사이의 피크 분해 값입니다.

피크 0 - 4 차 모멘트: 0 차에서 4 차까지의 피크 모멘트입니다.
(0 차 = 피크 영역, 1 차 = 평균 보존 시간, 2 차 = 피크 분산, 3 차 = 스큐잉 또는 수직 비대칭, 4 차 = 엑세스.)

피크 변곡점: 왼쪽 및 오른쪽 변곡점의 위치입니다.

피크 최대 점: 피크 최대값의 위치입니다. 함수 정의의 피크 중간 값에 위치하지 않을 수도 있습니다.

겹침 영역: 두 피크 사이의 겹친 영역입니다. 기저선 아래 영역은 제외합니다.

R1 과 R2 사이의 데이터 집합 영역: 데이터 집합과 기저선 사이의 영역입니다. R1 과 R2 사이 섹션만 계산합니다.

X1 과 X2 사이의 데이터 집합 영역: 데이터 집합과 기저선 사이의 영역입니다. x1 과 x2 사이 섹션만 계산합니다.

피크 위치를 ASCII 파일에 저장

Peak Fitting 마법사를 사용해서 비슷한 데이터 집합을 분석하는 경우에는 현재 피크 위치를 ASCII 파일에 저장해 두었다가 다음 데이터의 피크 초기화에 사용할 수 있습니다. 그러려면 Results 마법사 페이지의 Peak Centers and Height 그룹에서 Save 버튼을 클릭합니다. 그러면, Save Peak Centers and Heights 대화 상자가 열립니다. 파일 이름을 지정하고 Save 버튼을 클릭합니다.

이 피크 위치를 다음 데이터의 초기화에 사용하려면 Peak Finding 마법사 페이지에서 Read 버튼을 클릭합니다.

초기화 파일에 설정 저장

Peak Fitting 마법사를 사용해서 비슷한 데이터 집합을 분석하는 경우에는 마법사의 현재 피크와 기저선 설정, 및 보고서 설정을 초기화 파일에 저장할 수 있습니다. 그 후, 다음 데이터 집합을 분석할 때 이 초기화 파일을 사용해서 마법사를 초기화할 수 있습니다. 이 설정을 초기화 파일에 저장하려면 Results 마법사 페이지의 Initialization File 그룹에서 Save 버튼을 클릭합니다. 파일에서 마법사를 초기화하려면 Choose Data 페이지의 Read 버튼을 클릭합니다.

초기화 파일에는 다음과 같은 마법사 설정이 저장됩니다.

1) 피크 수, 피크 함수, 기저선 함수, 초기 매개변수 값, 매개변수 공유, 매개변수 값 고정, 상한 및 하한과 일반 선형 제한을 포함하는 피크 및 기저선의 특징.

2) 피크 특성 보고서 및 피팅 함수 매개변수 보고서 표시에 사용할 결과를 포함하는 보고서 설정.

주의: 피팅 절차 속성(반복 작업 횟수와 허용 범위)과 신뢰 및 예측 수준은, 현재 **Save** 버튼의 클릭 여부와 관계 없이 쓰기에 선택된 INI 파일에 항상 저장됩니다.

사용자 정의 마법사 만들기

Peak Fitting 마법사에 익숙해지고 나면 계속 일부 동작을 수행하는 페이지와 전혀 사용하지 않는 페이지가 있다는 것을 알게 됩니다. 데이터를 분석할 때와 비슷한 방식으로 마법사 페이지를 훑어 가면서 사용하지 않는 페이지나 항상 같은 동작을 수행하는 페이지를 숨기면 마법사를 단순하게 정리할 수 있습니다. 이렇게 사용자 정의된 마법사는 새 톨바 버튼에 저장한 후 나중에 사용할 수 있습니다. 사용자 정의 마법사를 만드는 작업에 관한 단계별 지시 사항은 "자습서 3, 사용자 정의 마법사 만들기"를 참조하십시오.

마법사 내에서 페이지를 숨기려면 마법사의 빈 부분(예를 들어 **Help** 버튼 아래)을 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭하고 **View Mode:Full** 을 선택합니다. 전체 뷰 모드는 마법사 디자인 모드입니다. 이 뷰 모드를 사용하면 마법사 맵에 있는 관련 체크 박스를 지워서 마법사 페이지의 표시를 끌 수 있습니다.

이제 마법사를 훑어 가며 숨길 페이지를 지정할 수 있습니다.

- 사용 동작이 없는 페이지를 숨기려면 마법사 맵에서 관련 체크 박스를 지웁니다.

- 같은 동작을 수행하는 페이지를 숨기려면 해당 페이지에서 동작을 수동으로 수행한 후(예를 들면 **Peak Finding** 페이지의 **Peaks** 버튼 클릭) 마법사 맵에서 해당 페이지의 체크 박스를 지웁니다. 사용자 정의 마법사를 실행하면서 이 페이지를 건너 뛸 때 마법사는 해당 동작을 자동으로 수행합니다.

사용자 정의 마법사에는 다음과 같은 동작을 저장할 수 있습니다.

Baseline Points 페이지: 라디오 버튼 선택.

Create Baseline 페이지: **Create Baseline** 그룹에서 항목 선택.

Baseline Conditioning 페이지: **Subtract Baseline** 버튼 클릭.

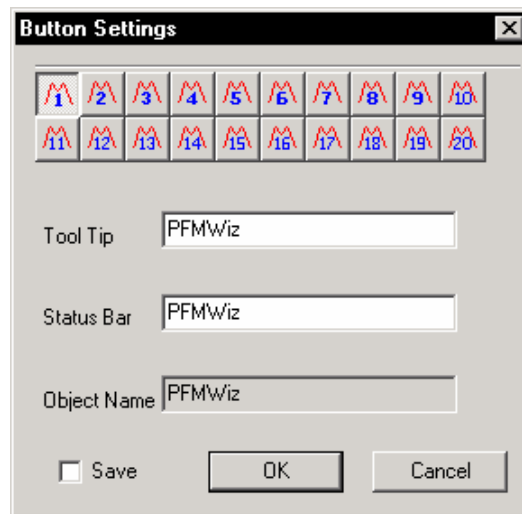
Peak Finding 페이지: Pick Peaks 버튼 클릭. Peak Type 그룹에서 내장 함수나 수정 또는 새로 정의된 함수 선택.

Fit 페이지: Fit 버튼 클릭.

원하는 마법사 맵 체크 박스를 지우고 나면 다음과 같이 단계에 따라 사용자 정의 마법사를 만듭니다.

- 1) Results 페이지에서 Save Procedure File 체크 박스를 선택합니다.
- 2) 마법사의 빈 영역을 다시 마우스 오른쪽 버튼으로 클릭한 후 단축 메뉴에서 **View Mode:Normal** 을 선택합니다. 숨기지 않은 페이지만 표시되도록 마법사 맵이 업데이트됩니다.
- 3) Finish 버튼을 클릭합니다. 그러면, Button Settings 대화 상자가 열립니다.

Button Settings 대화 상자



이 대화 상자를 사용하면 현재 마법사 설정과 동작을 새 툴바 버튼에 저장할 수 있습니다.

마법사의 Finish 버튼을 클릭한 후 Button Settings 대화 상자가 열릴 때에는 대화 상자의 왼쪽 위 버튼이 눌린 상태로 표시됩니다. 이 버튼에 사용자 정의 마법사 설정을 지정하거나 다른 버튼을 선택할 수 있습니다. 주의: 이 대화 상자에서는 비트맵 버튼의 사용 여부를 인식할 수 없습니다.

버튼의 툴팁과 상태 표시줄 메시지를 지정할 수 있습니다.

주의: 현재 마법사 설정을 PFM 툴바의 기본 **Peak Fitting** 마법사 버튼에 저장하려면 **Save** 체크 박스를 선택합니다.

OK 버튼을 클릭하면 **Origin** 은 이 버튼을 새 **PFMWiz** 툴바에 추가합니다.

피크 및 기저선 함수 참조

소 개

Peak Fitting 마법사를 사용하여 데이터를 함수에 피팅할 수 있습니다. 일반적인 모델 중 많은 경우가 속도와 신뢰도 면에서 뛰어난 내장 함수로 제공됩니다. 사용자 정의 함수를 통해 자신만의 함수 형식을 선택할 수도 있습니다.

피팅 함수를 직접 정의하는 방법을 익히려면 "**Peak Fitting** 마법사 참조"를 참조하십시오.

외부 DLL 에서 사용자 정의 피팅 함수를 만드는 방법을 익히려면 페이지 106의 "외부 DLL 함수"를 참조하십시오.

피크 함수

Gaussian

$$y = \frac{A}{w} \cdot \sqrt{\frac{4 \ln(2)}{\pi}} e^{-4 \ln(2) \frac{(x-xc)^2}{w^2}}$$

xc: 중간 점

A: 피크 영역

w: 최대값의 절반에서 전체 폭

LabTalk 스크립트 액세스: **gaussian(xc, A, w)**

Gauss2

크로마토그래피에 사용되는 형식의 Gaussian 함수입니다.

$$f(x) = \frac{A}{\sigma \sqrt{2\pi}} e^{-(x-r_t)^2 / 2\sigma^2}$$

r_t : 피크 최대값 시간; 보존 시간

A 피크 영역

σ : 피크의 표준 편차(sd)

LabTalk 스크립트 액세스: **gauss2(rt, A, sd)**

EMGauss

지수 함수로 수정된 Gaussian 함수입니다.

$$f(x) = \frac{A}{\tau} e^{\frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_G}{\tau} \right)^2 - \frac{x-x_G}{\tau}} \int_{-\infty}^z \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{y^2}{2}} dy$$

$$z = \frac{x-x_G}{\sigma_G} - \frac{\sigma_G}{\tau}$$

τ : 피크 최대값 시간. - 보존 시간

A: 피크 영역

σ_G : 피크의 표준 편차(sd)

x_G : 지수 축의 시간 상수(tc)

LabTalk 스크립트 액세스: **emgauss(rt, A, sd, tc)**

Lorentz

$$y = \frac{2A}{\pi} \cdot \frac{w}{4(x - xc)^2 + w^2}$$

Lorentz 함수입니다.

xc : 중간 점

A : 피크 영역

w : 최대값의 절반에서 전체 폭

LabTalk 스크립트 액세스: **lorentz(xc, A, w)**

Voigt

$$y = A \cdot \frac{2 \ln(2)}{\pi^{3/2}} \frac{w_L}{w_G^2} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{\left(\sqrt{\ln(2)} \frac{w_L}{w_G} \right)^2 + \left(\sqrt{4 \ln(2)} \frac{x - xc}{w_G} - t \right)^2} dt$$

A : 피크 영역

xc : 중간 점

w_G : 최대값의 절반에서 전체 Gaussian 폭

w_L : 최대값의 절반에서 전체 Lorentzian 폭

$\sqrt{\ln(2)} \frac{w_L}{w_G}$ 은 댐핑 상수라고 합니다. 이 함수는 무한 적분이 있기

때문에 계산 속도가 매우 느립니다.

LabTalk 스크립트 액세스: **voigt(xc, A, w_G, w_L)**

PsVoigt1

$$y = A \cdot \left[\mu \cdot \frac{2}{\pi} \cdot \frac{w}{4(x - xc)^2 + w^2} + (1 - \mu) \cdot \frac{\sqrt{4 \ln 2}}{\sqrt{\pi} w} \cdot e^{-\frac{4 \ln 2}{w^2}(x - xc)^2} \right]$$

1 형 Pseudo-Voigt 함수입니다.

A: 크기(amplitude)

xc: 중간 점

w: 최대값의 절반에서 전체 폭

μ : 프로파일 모양 계수

Gaussian 과 Lorentzian 은 같은 폭을 갖습니다.

LabTalk 스크립트 액세스: **PsVoigt1(xc, A, w, μ)**

PsVoigt2

$$y = A \cdot \left[\mu \cdot \frac{2}{\pi} \cdot \frac{w_L}{4(x - xc)^2 + w_L^2} + (1 - \mu) \cdot \frac{\sqrt{4 \ln 2}}{\sqrt{\pi} w_G} \cdot e^{-\frac{4 \ln 2}{w_G^2}(x - xc)^2} \right]$$

2 형 Pseudo-Voigt 함수입니다.

A 크기(amplitude)

xc: 중간 점

w_G : 최대값의 절반에서 전체 Gaussian 폭

w_L : 최대값의 절반에서 전체 Lorentzian 폭

μ : 프로파일 모양 계수

Gaussian 과 Lorentzian 은 서로 다른 폭을 갖습니다.

LabTalk 스크립트 액세스: **PsVoigt2(xc, A, w_G , w_L , μ)**

Pearson7

$$y = A \cdot \frac{2\Gamma(m) \cdot \sqrt{2^{1/m} - 1}}{\sqrt{\pi}\Gamma(m - \frac{1}{2})w} \cdot \left[1 + 4 \cdot \frac{2^{1/m} - 1}{w^2} \cdot (x - xc)^2 \right]^{-m}$$

PearsonVII 함수입니다.

A: 영역

xc: 중간 점

w: 최대값의 절반에서 전체 폭

m: 프로파일 모양 계수

LabTalk 스크립트 액세스: **Pearson7(xc, A, w, m)**

Asym2Sig

$$y = A \cdot \frac{1}{1 + e^{-\frac{x - xc + w_1/2}{w_2}}} \cdot \left[1 - \frac{1}{1 + e^{-\frac{x - xc - w_1/2}{w_3}}} \right]$$

비대칭 이중 시그모이달 함수입니다.

A 크기(amplitude)

xc: 중간 점

w₁: 폭 1

w₂: 폭 2

w₃: 폭 3

LabTalk 스크립트 액세스: **Asym2Sig(xc, A, w₁, w₂, w₃)**

Weibull3

$$S = \frac{x - xc}{w_1} + \left(\frac{w_2 - 1}{w_2} \right)^{\frac{1}{w_2}}$$

$$y = A \cdot \left(\frac{w_2 - 1}{w_2} \right)^{\frac{1 - w_2}{w_2}} [S]^{w_2 - 1} e^{-[S]^{w_2} + \left(\frac{w_2 - 1}{w_2} \right)}$$

A: 크기(amplitude)

xc: 중간 점

w₁: 폭 1

w₂: 폭 2

LabTalk 스크립트 액세스: **Weibull3(xc, A, w₁, w₂)**

LogNormal

일반 로그 함수입니다.

$$y = H \cdot e^{-(\ln(x) - \ln(x_c))^2 / (2 \cdot w^2)}$$

X_c: 중간 점

H: 높이

w: 폭

LabTalk 스크립트 액세스: **lognorml(xc, H, w)**

GCAS

Gram-Charlier A-Series 입니다.

$$f(x) = \frac{A}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-z^2/2} \left(1 + \sum_{i=3}^4 \frac{A_i}{i!} H_i(z) \right)$$

$$z = \frac{x - r_t}{\sigma}$$

r_t: 피크 최대값 시간; 보존 시간

A 피크 영역

σ: 피크의 표준 편차(sd)

A₃: 스큐잉

A₄: 익세스

H₃: z³-3z

H₄: z⁴-6z³+3

LabTalk 스크립트 액세스: **gcas(rt, A, sd, A3, A4)**

ECS

Edgeworth-Cramer Series 함수입니다.

$$f(z) = \frac{A}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-z^2/2} \left(1 + \frac{A_3}{3!} H_3(z) + \frac{A_4}{4!} H_4(z) + \frac{10A_4^2}{6!} H_6(z) \right)$$

$$z = \frac{x - r_t}{\sigma}$$

r_t : 피크 최대값 시간; 보존 시간

A 피크 영역

σ : 피크의 표준 편차.

A_3 : 스큐잉

A_4 : 익세스

H_3 : $z^3 - 3z$

H_4 : $z^4 - 6z^2 + 3$

H_6 : $z^6 - 15z^4 + 45z^2 - 15$

LabTalk 스크립트 액세스: **ecs(rt , A , sd , $A3$, $A4$)**

CCE

Chesler-Cram 등식입니다.

$$f(x) = C_1 \left\{ e^{-\frac{(x-C_4)^2}{2C_5}} + \left[1 - 0.5 \cdot \left(1 - \tanh(C_2(x - C_3)) \right) \right] \cdot C_6 \cdot e^{-0.5C_7[|x-C_8| + (x-C_8)]} \right\}$$

C_1 : 피크 높이

C_4 : 피크 최대값 시간; 보존 시간

C_5 : 피크의 표준 편차.

LabTalk 스크립트 액세스: **cce($C4$, $C1$, $C5$, $C2$, $C3$, $C6$, $C7$, $C8$)**

BiGauss

비대칭 Gaussian 함수입니다.

$x < r_t$ 이면

$$f(x) = H e^{-(x-r_t)^2 / 2\sigma_1^2}$$

그렇지 않으면

$$f(x) = H e^{-(x-r_t)^2 / 2\sigma_2^2}$$

r_t : 피크 최대값 시간; 보존 시간

H 피크 높이

σ_1 : 피크의 왼쪽 표준 편차(sd1)

σ_2 : 피크의 오른쪽 표준 편차(sd2)

LabTalk 스크립트 액세스: **bigauss(rt, H, sd1, sd2)**

InvsPoly

$$y = \frac{A}{1 + A1 \cdot \left(2 \cdot \frac{x-xc}{w}\right)^2 + A2 \cdot \left(2 \cdot \frac{x-xc}{w}\right)^4 + A3 \cdot \left(2 \cdot \frac{x-xc}{w}\right)^6}$$

역 다항 함수입니다.

A: 크기(amplitude)

xc: 중간 점

w: 폭

A1 계수

A2: 계수

A3: 계수

A1 = 1, A2 = 0, A3 = 0 이면 이 함수는 Lorentzian 입니다. **A1 = 1, A2 = 1/2, A3 = 1/6** 이면 이 함수는 Gaussian 입니다.

LabTalk 스크립트 액세스: **InvsPoly(xc, A, w, A1, A2, A3)**

Sine

105 페이지 "Sine"를 참조하십시오.

SineSqr

105 페이지의 "SineSqr"를 참조하십시오.

SineDamp

105 페이지의 "SineDamp"를 참조하십시오.

Power2

$$y = A \cdot |x - xc|^{p1} \quad \text{for } x < xc$$
$$y = A \cdot |x - xc|^{p2} \quad \text{for } x > xc$$

xc: 중간 점

A: 크기(amplitude)

p1: 왼쪽 지수

p2: 오른쪽 지수

LabTalk 스크립트 액세스: **Power2(xc, A, p1, p2)**

Pulse

$$y = A \cdot \left(1 - e^{-\frac{x-xc}{t1}} \right)^p e^{-\frac{x-xc}{t2}}$$

xc: 중간 점

A: 크기(amplitude)

t1: 매개변수 3

t2: 매개변수 4

p: 매개변수 5

LabTalk 스크립트 액세스: **Pulse(xc, A, t1, t2, p)**

주기 피크 함수

이 절에 나와 있는 피팅 함수는 주기 함수입니다. 이 함수는 다음과 같은 두 가지 경우를 제외하면 피크 함수와 같은 방식으로 사용됩니다.

- 1) 이 함수는 선택하면 모든 피트에 적용됩니다.
- 2) 자동 초기화를 수행할 수 없기 때문에 함수 매개변수를 초기화해야 합니다.

SineDamp

$$y = A \cdot e^{-\frac{x}{t0}} \cdot \sin\left(\pi \cdot \frac{x - xc}{w}\right)$$

A: 크기(amplitude)

xc: 중간 점

w: 폭

t0: 감소 시간

LabTalk 스크립트 액세스: **SineDamp(xc, A, w, t0)**

Sine

$$y = A \cdot \sin\left(\pi \cdot \frac{x - xc}{w}\right)$$

A: 크기(amplitude)

xc: 중간 점

w: 폭

LabTalk 스크립트 액세스: **Sine(xc, A, w)**

SineSqr

$$y = A \cdot \sin^2\left(\pi \cdot \frac{x - xc}{w}\right)$$

A: 크기(amplitude)

xc : 중간 점

w : 폭

LabTalk 스크립트 액세스: **SineSqr(xc, A, w)**

기저선 함수

Line

$$y = A + B \cdot x$$

A : 절편

B : 기울기

LabTalk 스크립트 액세스: **Line(A, B)**

Parabola

$$y = A + B \cdot x + C \cdot x^2$$

LabTalk 스크립트 액세스: **Parabola(A, B, C)**

Cubic

$$y = A + B \cdot x + C \cdot x^2 + D \cdot x^3$$

LabTalk 스크립트 액세스: **Cubic(A, B, C, D)**

Poly4

$$y = A0 + A1 \cdot x + A2 \cdot x^2 + A3 \cdot x^3 + A4 \cdot x^4$$

LabTalk 스크립트 액세스: **Poly4($A0, A1, A2, A3, A4$)**

Poly5

$$y = A0 + A1 \cdot x + A2 \cdot x^2 + A3 \cdot x^3 + A4 \cdot x^4 + A5 \cdot x^5$$

LabTalk 스크립트 액세스: **Poly5(A0, A1, A2, A3, A4, A5)**

ExpDec1

$$y = Y0 + A \cdot e^{-\frac{x}{t0}}$$

LabTalk 스크립트 액세스: **ExpDec1(Y0, A, t0)**

ExpDec2

$$y = Y0 + A1 \cdot e^{-\frac{x}{t1}} + A2 \cdot e^{-\frac{x}{t2}}$$

LabTalk 스크립트 액세스: **ExpDec2(Y0, A1, t1, A2, t2)**

ExpGrow1

$$y = Y0 + A \cdot e^{\frac{x}{t0}}$$

LabTalk 스크립트 액세스: **ExpGrow1(Y0, A, t0)**

ExpGrow2

$$y = Y0 + A1 \cdot e^{\frac{x}{t1}} + A2 \cdot e^{\frac{x}{t2}}$$

LabTalk 스크립트 액세스: **ExpGrow2(Y0, A1, t1, A2, t2)**

Hyperbl

$$y = Y0 + \frac{A1 \cdot x}{A2 + x}$$

사각 쌍곡선 함수입니다.

LabTalk 스크립트 액세스: **Hyperbl(Y0, A1, A2)**

외부 DLL 함수

외부 DLL 을 피크의 피팅 함수로 사용할 수 있습니다. PFM 에는 샘플 피팅 함수 DLL(DLL_FUNC.DLL)과 그 소스 코드(DLL_FUNC.C), 모듈 정의 파일(DLL_FUNC.DEF), 필요한 헤더 파일(LABFIT.H)이 포함되어 있습니다. 또한, DLL 이 포함된 단순 Gaussian 함수의 함수 정의 파일(DLL_FUNC.PKF)도 포함되어 있습니다.

다음의 단계는 PFM 에서 이 함수를 사용하는 방법을 보여줍니다. (이 Gaussian DLL 함수는 사전에 설치되어 있지만, 여기에서는 예를 들기 위해 단계를 포함시켰습니다.)

- 1) DLL 을 Origin 소프트웨어 폴더(Origin 실행 파일과 PFM DLL 이 설치된)에 복사합니다.
- 2) 함수 정의 파일 DLL_FUNC.PKF 를 Origin \FITFUNC 폴더에 복사합니다.
- 3) PKF 파일 이름(이 경우 DLL_FUNC)이 PFM.INI 파일의 [FittingFunctions] 섹션에 있는 적절한 목록(PeakFuncList 또는 BaseFuncList)에 나타나도록 PFM.INI 파일을 편집합니다.

이 단계를 완료한 후, Origin 과 Peak Fitting 마법사를 다시 시작하면 Peak Finding 마법사 페이지의 Set/Modify 버튼을 클릭했을 때 Available Functions 리스트 박스에 함수가 표시됩니다. DLL 이름, DLL 에 있는 함수 이름, PKF 파일 이름은 서로 구분이 되는 것이지만, 이 예에서는 모두 "DLL_FUNC"를 사용했습니다. 즉:

- 1) DLL 이름은 사용자 정의 값입니다. 한 DLL 에 여러 함수를 포함할 수 있습니다.
- 2) DLL 에 있는 함수의 이름은 함수의 원형을 만들고 함수를 정의하기 위해 소스 코드에 사용하는 실제 C 식별자입니다. 이 함수 이름은 모듈 정의(DEF) 파일의 EXPORTS 섹션에서 함수 참조에 사용되는 순서 번호와 함께 표시되어야 합니다.
- 3) 함수 정의 파일(PKF 파일)에는 DLL 의 이름과 NAME 필드의 적절한 함수 순서 번호가 포함되어야 합니다.

4) 함수 정의 파일(DEF 파일이 아닌 PKF 파일)의 이름은 함수 리스트 박스에 나타나는 이름입니다. 이것은 DLL 이름이나 DLL 로 내보내는 함수 이름과는 구분됩니다.

샘플 DLL 의 소스 코드에는 설명이 포함되어 있는데, 이를 수정하여 원하는 함수를 제공할 수 있습니다.

DLL 함수의 함수 정의 파일은 제공되는 샘플 DLL_FUNC.PKF 에서 수정할 수 있는데, 그럴 때에는 다음과 같은 요구 사항을 준수해야 합니다.

1) 매개변수의 개수와 그 이름이 DLL 에 필요한 값과 일치하도록 NPARAM 과 PARAMETERS 필드를 편집합니다.

2) 매개변수는 항상 “중간 점, 영역, 폭, (기타...)” 순으로 사용해야 합니다.

3) 매개변수의 시작 값은 INITVAL 필드에서 편집할 수 있습니다. 사용자가 설정할 수 있는 매개변수를 남겨 두려면 매개변수의 위치에 “#”을 입력합니다.

4) UPPERBOUND 와 LOWERBOUND 필드도 몇 가지 제한을 이용해서 편집할 수 있습니다. 영역과 폭 매개변수의 하한은 0 이어야 하고, 중간 점 매개변수는 “!”로 남겨 두어야 합니다. 그러면 PFM 에서 해당 매개변수의 제한을 결정할 수 있습니다. 또한, 매개변수는 피팅 세션 중에 변할 수 있습니다.

5) OPTIONS 필드의 마지막 요소는 키워드 “PEAK”로 설정되어야 합니다.

6) PKF 파일의 다른 모든 필드는 업데이트가 가능한 FORMULA 를 제외하고는 그대로 두어야 합니다. DLL 함수의 경우, FORMULA 필드는 사용자에게 유용한 함수에 대한 설명에 불과합니다. 사용자 정의 스크립트 함수의 경우, 이 필드가 실질적으로 함수를 정의하기 때문에 적절한 LabTalk 구문을 따라야 합니다.

LabTalk 를 이용한 PFM 프로그래밍

소 개

Origin 의 내장 스크립트 언어인 LabTalk 를 사용하면 Origin 과 PFM 에 대한 제어를 확장할 수 있습니다. 스크립트를 사용하면 사용자 정의 시스템을 설정할 수도 있습니다. PFM 은 LabTalk 에 새로운 메소드와 속성을 추가하여 PFM 의 모든 기능을 수용합니다. 메소드는 잔류 그림 만들기 등의 작업을 수행하는 LabTalk 명령입니다. 속성은 변수와 비슷합니다. 구성 파일 EASYPEAK.CNF 에서는 LabTalk 를 사용하여 PFM 을 설정합니다. 이 파일은 PFM 프로그래밍의 예로 사용할 수 있습니다.

주의: 텍스트 속성에 텍스트를 할당할 때에는 텍스트를 따옴표" "로 묶습니다.

기본 PFM 스크립트: 시작하기

이 속성 및 메소드를 사용하면 기본 수준에서 피크 분석을 수행할 수 있습니다.

기본 피크 피팅 속성

pf.bColY\$, pf.bColX\$ 읽기/쓰기, 문자열. **pf.bType = 11** 일 때의 기저선 데이터 집합입니다. 보통은 선택한 Y 열에 연결된 X 열이 자동 할당되기 때문에 **pf.bColY\$**만 있으면 됩니다.

pf.bFunc\$ 읽기/쓰기, 문자열. 기저선의 피팅 함수입니다. 기저선은 피크의 배경입니다. 기저선은 **pf.bType** 의 결정에 따라 함수, 데이터 집합, 또는 사용자가 그린 선이 될 수 있습니다.

주의: 수학적인 여러 함수 외에도 다음과 같은 특수 함수가 있습니다.

Dataset(pf.bType = 11): 데이터 집합을 기저선으로 사용합니다. **pf.bColY\$**와 **pf.bColX\$**을 사용하여 기저선 데이터 집합을 할당합니다.

FreeForm(pf.bType = 12): 사용자가 그린 선을 기저선으로 사용합니다. 이 선을 직선 세그먼트로 연결합니다. **pf.makeBase()** 메소드를 사용하여 내부 기저선 데이터 집합을 만듭니다. 123 페이지의 "부가 메소드 및 속성"을 참조하십시오

Spline(pf.bType = 13): 사용자가 그린 선을 기저선으로 사용합니다. 이 선을 입방체 스플라인으로 연결합니다. **pf.makeBase()** 메소드를 사용하여 내부 기저선 데이터 집합을 만듭니다. 123 페이지의 "부가 메소드 및 속성"을 참조하십시오.

pf.bType 읽기 전용, 숫자. 기저선 유형:

- 0: 일반 내장 함수.
- 1: 수식 형식의 사용자 정의 함수.
- 2: Y-스크립트 형식의 사용자 정의 함수.
- 3: 외부 DLL 함수.
- 5: 기저선으로 사용되는 내장 피크 함수.
- 11: 기저선으로 사용되는 데이터 집합.
- 12: 기저선으로 사용되는 사용자가 그린 **FreeForm** 선.
- 13: 기저선으로 사용되는 사용자가 그린 스플라인 선.

pf.curPeak 읽기/쓰기, 숫자. 현재 피크입니다. **pf.nPeaks** 개의 피크가 있기 때문에 이 속성을 사용하여 매개변수에 액세스할 피크를 지정해야 합니다. 값은 0 과 **pf.nPeaks** 사이여야 합니다. 0 값은 기저선에 해당됩니다. 이 값은 내부에서 변경할 수 있기 때문에 정확한 피크에서 작업할 수 있도록 이 값의 변경되지는 않지는 주의 깊게 지켜봐야 합니다. 이 속성은 **pf.pn**, **pf.vn**, **pf.en**, **pf.ln**, **pf.un**, **pf.nn** 속성에 영향을 줍니다.

pf.fType 읽기 전용, 숫자. 데이터 집합에 있는 모든 피크의 함수 유형:

- 0: 일반 내장 함수.
- 1: 수식 형식의 사용자 정의 함수.
- 2: Y-스크립트 형식의 사용자 정의 함수.
- 3: 외부 DLL 함수.
- 7: 컨볼루션 형식의 사용자 정의 함수.

pf.func\$ 읽기/쓰기, 문자열. 모든 피크의 피팅 함수입니다. 이 속성에서는 모든 피크가 같은 피팅 함수를 가지고 있다고 가정합니다. 예를 들어, **pf.func\$="gaussian"**은 Gaussian 함수를 피팅 데이터 집합의 모든 피크에 대한 피팅 함수로 설정합니다. **pf.selFitFunc()** 메소드를 사용하여 기존 피팅 함수를 선택하거나 새 함수를 정의할 수 있습니다.

pf.nParan 읽기/쓰기, 숫자. n 번째 피크의 매개변수 개수입니다. n 이 0 과 같을 때에는 기저선의 매개변수 개수가 사용됩니다.

pf.nPeaks 읽기/쓰기, 숫자. 피팅 데이터 집합의 피크 수입니다. 예를 들어, **pf.nPeaks=5** 는 피팅 데이터 집합에 다섯 개의 피크가 있다는 것을 나타냅니다.

pf.pn 읽기/쓰기, 숫자. 현재 피크의 n 번째 매개변수 값입니다(**pf.curPeak** 에서 주어진). n 은 1 과 **pf.nParan** 사이에 있어야 합니다. 이 속성을 사용하여 매개변수를 초기화하거나 피팅된 매개변수를 가져올 수 있습니다.

pf.vn 읽기/쓰기, 숫자. 현재 피크에 있는 n 번째 매개변수의 고정/변화 상태입니다(**pf.curPeak** 에서 주어진). **pf.vn = 0** 을 사용하여 n 번째 매개변수를 현재 값에 피팅해서 피팅 중에 값이 수정되지 않도록 합니다. n 번째 매개변수의 변화를 허용하려면 **pf.vn = 1** 을 사용합니다.

pf.w\$ 읽기/쓰기, 문자열. 가중치 데이터 집합입니다. 가중치 데이터 집합은 각 데이터 점의 기여도를 지정합니다. **pf.wType** 메소드 아래에 설명된 가중치에는 네 가지 유형이 있습니다.

pf.wType 읽기/쓰기, 숫자. 피팅 데이터 집합의 가중치 유형입니다. **0**: 가중치 없음; **1**: 기계적 가중치; **2**: 통계적 가중치; **3**: 가중치에 사용되는 지정 데이터 집합. 가중치 데이터 집합을 할당하려면 **pf.w\$**을 사용합니다.

pf.x\$ 읽기/쓰기, 숫자. 데이터 집합의 X 열은 PFM 에서 피팅합니다. 이 열은 피팅 함수의 독립 변수에 해당합니다. 이미 **pf.y\$**을 사용한 경우에는 **pf.x\$**가 필요 없습니다(다른 X 열을 원하는 경우는 제외). 하지만, **pf.x\$**을 사용해서 기본값이 아닌 X 열을 지정하기 전에 **pf.y\$**를 사용해서 Y 열을 지정해야 합니다.

pf.y\$ 읽기/쓰기, 문자열. PFM 에서 피팅할 데이터 집합의 Y 열입니다. 이 열은 피팅 함수의 종속 변수에 해당됩니다. 피팅 작업을 시작하기 전에 이 열을 설정해야 합니다. PFM 은 해당 X 열을 자동 할당하기 때문에 X 열에 다시 다른 열을 할당하지 않는 한 **pf.x\$** 속성을 설정할 필요는 없습니다.

예제: **pf.y\$="data1_y"**는 Data1 워크시트의 Y 라는 열을 피팅할 데이터 집합으로 지정합니다.

기본 피크 피팅 – 메소드

pf.editPara(n) Edit Fitting Parameters 대화 상자를 열고 *n* 번째 피크의 매개변수를 편집합니다.

pf.fit(n) Levenberg-Marquardt 피팅을 *n* 회 수행합니다. 허용 범위 값(**pf.tolerance**)이 충족되면 PFM 은 지정된 반복 횟수를 모두 채우기 전에 중단됩니다. *n* = -1 이면 PFM 은 **pf.nlter** 회까지 피팅합니다. 보다 상세한 설명은 118 페이지의 "PFM 제어"를 참조하십시오.

pf.init() PFM 을 초기화합니다. 모든 시스템 변수는 기본값으로 설정됩니다.

pf.selFitFunc(cntrl, n) Select Fitting Function 대화 상자를 엽니다. Available Functions 리스트에서 함수를 선택하거나 새 함수를 정의할 수 있습니다.

cntrl = **All**: 모든 피크에 피팅 함수를 설정합니다.

cntrl = **Peak**: 피크 *n* 에 피팅 함수를 설정합니다.

cntrl = **Base**: 기저선에 피팅 함수를 설정합니다.

pf.unInit() PFM 의 초기화를 취소합니다.

결과 가져오기

피팅이 끝나면 다음 메소드 및 속성으로 피팅 결과를 가져올 수 있습니다.

피팅 결과 – 속성

pf.areaDn 읽기 전용, 숫자. 데이터를 기준으로 한, 피팅 피크 아래의 실제 영역입니다. 피크 중에는 그 테일(tails)이 데이터 범위를 넘어서서 데이터 아래의 실제 영역이 **pf.arean**에서 주어진 전체 피크보다 작은 것도 있습니다.

pf.arean 읽기 전용, 숫자. n 번째 피크의 피팅 영역입니다. 피팅 데이터 집합이 *아닌* 함수 정의에 따라 계산한 영역입니다.

pf.centern 읽기 전용, 숫자. n 번째 피크의 중간 점입니다. 일반적으로 이 값은 **pf.p1** 속성에서 주어지는 피크의 첫 매개변수입니다.

pf.chiSqr 읽기 전용, 숫자. 피팅의 카이제곱 값입니다.

pf.COD 읽기 전용, 숫자. 피팅의 결정 계수입니다.

pf.confidence 읽기/쓰기, 숫자. 신뢰 값입니다. 신뢰 값이 주어지면 매개변수의 신뢰 제한은 물론, 피팅 커브의 신뢰대/예측 밴드도 계산할 수 있습니다. 이 속성은 이 값을 기본값인 0.95에서 0과 1 사이의 값으로 변경합니다. 이 새 값은 더 이상의 할당 내용이 생길 때까지 변경되지 않고 PFM 안에 남습니다.

pf.COR 읽기 전용, 숫자. 반복 작업의 마지막에 계산하는 상관 계수입니다.

pf.DOF 읽기 전용, 숫자. 자유도입니다.

pf.en 읽기 전용, 숫자. 현재 피크에 있는 n 번째 매개변수의 표준 오차 값입니다(**pf.curPeak**에서 주어집니다. 110 페이지의 "기본 PFM 스크립트: 시작하기"를 참조하십시오.)

pf.err 읽기 전용, 숫자. 오류 코드입니다. **pf.msgPrompt=0** 속성을 사용해서 오류 메시지 박스를 억제한 경우에는 이 속성을 사용해서 오류 코드를 봅니다.

PFM은 오류 메시지 중 다수를 Origin의 비선형 커브 필터와 공유합니다. PFM의 고유 메시지만 여기에 나열됩니다.

28051: Error(오류)! The peak number 'XXXX' is out of the valid

range(피크 번호 'XXXX'는 유효한 값 범위를 벗어납니다). The valid number must be between 0 and **pf.npeaks**. 28052: (유효한 값은 0 과 **pf.npeaks** 사이라야 합니다. 28052:) Error(오류)! The dataset number 'XXXX' is out of the valid range(데이터 집합 번호 'XXXX'는 유효한 값 범위를 벗어납니다). The valid number must be between 0 and **pf.ndata**.

28053:(유효한 값은 0 과 **pf.ndata** 사이라야 합니다. 28053:) Error(오류)! The parameter name 'XXXX' is too long. Use names with less than 8 characters(매개변수 이름 'XXXX'가 너무 길니다. 8 문자 이하의 이름을 사용하십시오).

28054: Error(오류)! You need to first assign a fitting function to the peak 'XXXX'(먼저 피크 'XXXX'에 피팅 함수를 할당해야 합니다). The peak XXXX has not been assigned a fitting function.(피크 XXXX 에 피팅 함수가 할당되지 않았습니다.) You cannot do any computation on this peak(이 피크에서 계산을 수행할 수 없습니다.)

28055: Error(오류)! The user-defined function is invalid(사용자 정의 함수가 유효하지 않습니다). Redefine it with the correct format(올바른 형식으로 다시 정의하십시오). For more information, see "Peak Fitting Wizard Reference".(자세한 내용은 "Peak Fitting Wizard 참조"를 참조하십시오.)

28056: Error(오류)! The user-defined function 'XXXX' has no parameters(사용자 정의 함수 'XXXX'에 매개변수가 없습니다). For more information, see "Peak Fitting Wizard Reference".(자세한 내용은 "Peak Fitting Wizard 참조"를 참조하십시오.)

28057: Error(오류)! The user-defined function 'XXXX' has an insufficient number of parameters(사용자 정의 함수 'XXXX'의 매개변수 수가 부족합니다). For more information, see "Peak Fitting Wizard Reference".(자세한 내용은 "Peak Fitting Wizard 참조"를 참조하십시오.)

28059: Error(오류)! The dataset 'XXXX' does not exist(데이터 집합 'XXXX'가 없습니다).

28060: Error(오류)! The number of correct arguments is less than what is needed(올바른 인수의 수가 필요한 것보다 적습니다). The operation cannot continue(작업을 계속할 수 없습니다). Check the syntax of the method.(메소드의 구문을 확인합니다.)

28061: Error(오류)! No dataset is specified for fitting operations(피팅 작업에 데이터 집합이 지정되지 않았습니다). The operation cannot continue(작업을 계속할 수 없습니다). You need to supply a fitting dataset to the PFM.(PFM 에 피팅 데이터 집합을 제공해야 합니다.)

28062: Error(오류)! No fitting function has been set(피팅 함수가 설정되지 않았습니다). Set appropriate functions first before continuing the current operation.(현재 작업을 계속하기 전에 먼저

적절한 함수를 설정합니다.)

28063: 경고: Initialization of the parameters of a fitting function failed(피팅 함수의 매개변수를 초기화하지 못했습니다). You have to supply the initial parameter values yourself.(초기 매개변수 값을 직접 제공해야 합니다.)

28064: Error(오류)! The dataset 'XXXX' has no valid elements(데이터 집합 'XXXX'에 유효한 요소가 없습니다). No computation can be performed(계산을 수행할 수 없습니다). This will occur if the data range is 0 or if all the values in the dataset are missing.(데이터 범위가 0 이거나 데이터 집합의 모든 값이 손실된 경우에 이 오류가 발생합니다.)

28065: Error(오류)! There are not enough data points in the dataset(s) 'XXXX' to be fitted(피팅할 데이터 집합 'XXXX'에 데이터 점이 충분하지 않습니다). 손실된 셀이 너무 많거나 피팅 범위가 너무 작습니다. Check the dataset(s) to be fitted and the data range.(피팅할 데이터 집합과 데이터 범위를 확인하십시오.)

28066: Error(오류)! There are too many bad functional evaluations(잘못된 함수 평가가 너무 많습니다). The parameter values of the fitting functions may be out of the valid range.(피팅 함수의 매개변수 값이 유효한 범위를 벗어난 경우일 수 있습니다.) Check the parameter values.(매개변수 값을 확인하십시오.)

pf.FWHM n 읽기 전용, 숫자. 피팅 곡선을 기준으로 n 번째 피크의 피크 높이 최대값의 절반에 해당하는 전체 폭입니다.

pf.height n 읽기 전용, 숫자. n 번째 피크의 최대값입니다.

pf.ln 읽기 전용, 숫자. 주어진 신뢰 값(**pf.confidence**)에서 현재 피크(**pf.curPeak** 에서 주어집니다. 주어진 신뢰값에 대한 자세한 설명은 110 페이지의 "기본 PFM 스크립트: 시작하기"를 참조하십시오.)

주의: 먼저 **pf.confidence** 와 **pf.paraConf()**를 사용해야 합니다.

pf.nIterGood 읽기 전용, 숫자. 실제로 수행한 반복 작업 횟수입니다.

pf.nn 읽기 전용, 숫자. 현재 피크(**pf.curPeak** 에서 주어집니다. 110 페이지의 "기본 PFM 스크립트: 시작하기"를 참조하십시오). PFM 은 피크를 나타내기 위해 매개변수 이름에 숫자를 추가하기 때문에 이름이 함수의 원래 정의와 다를 수도 있습니다.

pf.nParaVary 읽기 전용, 숫자. 가변 매개변수의 개수입니다.

pf.nPoints 읽기 전용, 숫자. 계산에 사용된 데이터의 총 수입니다.

pf.percentn 읽기 전용, 숫자. 데이터 프로파일 전체에서의 피크 영역 백분율입니다.

pf.pn 읽기/쓰기, 숫자. **pf.curPeak** 에서 주어지는 현재 피크의 n 번째 매개변수 값입니다. N 은 1 에서 **pf.nParam** 까지라야 합니다. 이 속성을 사용하여 매개변수를 초기화하거나 피팅된 매개변수를 가져올 수 있습니다.

보다 상세한 설명은 110 페이지의 "기본 PFM 스크립트: 시작하기"를 참조하십시오.

pf.SSR 읽기 전용, 숫자. 제곱의 합입니다.

pf.un 읽기 전용, 숫자. 주어진 신뢰 값(**pf.confidence**)에서 현재 피크(**pf.curPeak** 에서 주어집니다. 주어진 신뢰값에 대한 자세한 설명은 110 페이지의 "기본 PFM 스크립트: 시작하기"를 참조하십시오.)

주의: 먼저 **pf.confidence** 와 **pf.paraConf()**를 사용해야 합니다.

pf.widthn 읽기 전용, 숫자. 피크 함수에 정의된 n 번째 피크의 폭 매개변수입니다. 함수 정의에 따라 실제 피크 폭과 다를 수도 있습니다.

피팅 결과 – 메소드

pf.coVar(covar) 분산-공분산 행렬 *covar*를 만듭니다.

pf.funcVal(n, x) $n = 0$ 일 때 $X = x$ 에서 기저선의 함수 값이나 $n = -1$ 일 때의 피팅 커브, 또는 $n > 0$ 일 때의 n 번째 피크를 반환합니다.

pf.makeResidual() 잔류 데이터 집합 **residual_y**을 만듭니다. 잔류 값은 원래 데이터 집합과 피팅 커브 사이의 차이입니다.

pf.paraConf() 각 매개변수에 대해 신뢰 구간을 계산합니다.
매개변수 n 의 신뢰 상한에 **pf.un**을 사용하고 신뢰 하한에 **pf.ln**을 사용하여 결과를 봅니다. 0.95 외의 값이 필요한 경우에는 **pf.confidence**를 사용하여 신뢰 값을 설정합니다.

PFM 제어

다음 속성을 사용해서 PFM을 조정합니다.

고급 제어 - 속성

pf.derivStep 읽기/쓰기, 숫자. 미분 값 계산에 사용되는 매개변수 변량(Δx)입니다. 값이 작을수록 정확해지지만 근사 처리 오류가 생길 수 있습니다. 기본값은 0.000001입니다.

pf.mu 읽기/쓰기, 숫자. 곡률 행렬의 대각선 배율 값입니다. 이 값은 Levenberg-Marquardt 루틴에서 중요합니다. 기본 시작 값은 0.001입니다.

pf.muMin 읽기 전용, 숫자. 지금까지 도달한 최소 MU 값입니다.

pf.nlter 읽기/쓰기, 숫자. **pf.fit(-1)** 메소드를 사용하는 경우 피팅 반복 작업의 기본 횟수입니다.

보다 상세한 설명은 110 페이지의 "기본 PFM 스크립트: 시작하기"를 참조하십시오.

pf.tolerance 읽기/쓰기, 숫자. 반복 작업을 중단하는 허용 범위 값입니다. 허용 범위 값은 중단 기준입니다. 기본값은 0.05입니다. 허용 범위가 작을수록 기준을 충족시킬 때까지 수행해야 하는 반복 작업의 횟수가 많아집니다.

함수가 다른 피크

데이터 집합에 있는 피크가 다른 함수로 설명되는 경우도 종종 있습니다. 예를 들어, 첫 피크는 **Gaussian** 인데 다음 피크는 **Lorentzian** 인 경우를 들 수 있다. 다음의 속성을 사용하면 각 피크에 다른 함수를 사용하여 데이터를 피팅할 수 있습니다.

함수가 다른 피크 - 속성

pf.pBeginn 읽기/쓰기, 숫자. n 번째 피크 피팅 데이터 범위의 첫 행 번호입니다. 기본값은 Y 열 데이터 범위의 시작 부분 값입니다.

pf.pBeginXn 읽기/쓰기, 숫자. n 번째 피크 피팅 데이터 범위의 X 하한입니다. 기본값은 Y 열 데이터 범위의 시작 부분 값입니다.

pf.peakOnn 읽기/쓰기, 숫자. 활성화되어 계산에 사용되는 n 번째 피크입니다. 유효한 피크만 활성화할 수 있습니다. 기본값은 **1**: 활성 상태.

pf.pEndn 읽기/쓰기, 숫자. n 번째 피크 피팅 데이터 범위의 마지막 행 번호입니다. 기본값은 Y 열 데이터 범위의 끝 부분 값입니다.

pf.pEndXn 읽기/쓰기, 숫자. n 번째 피크 피팅 데이터 범위의 X 상한입니다. 기본값은 Y 열 데이터 범위의 끝 부분 값입니다.

pf.pFuncn\$ 읽기/쓰기, 문자열. n 번째 피크의 피팅 함수입니다. 모든 피크에 피팅 함수를 할당하는 속성 **pf.func\$**와는 다릅니다.

pf.pStepn 읽기/쓰기, 숫자. n 번째 피크 피팅 데이터 범위의 단계 크기입니다. 기본값은 **1** 입니다.

pf.pTypen 읽기 전용, 숫자. n 번째 피크의 함수 유형입니다. $n = 0$ 의 값은 기저선 유형을 나타냅니다.

0: 일반 내장 함수.

1: 수식 형식의 사용자 정의 함수.

2: Y-스크립트 형식의 사용자 정의 함수.

3: 외부 DLL 함수.

5: 기저선으로 사용되는 내장 피크 함수.

11: 기저선으로 사용되는 데이터 집합.

12: 기저선으로 사용되는 사용자가 그린 FreeForm 선.

13: 기저선으로 사용되는 사용자가 그린 스플라인 선.

pf.pValid n 읽기 전용, 숫자. n 번째 피크가 유효한지, 즉 유효한 피팅 함수가 할당되었는지 확인합니다. **0**: 유효하지 않음, **1**: 유효함.
pf.func\$ 속성을 성공적으로 적용하면 모든 피크가 유효해집니다.
pf.pfunc n \$ 속성은 n 번째 피크를 유효하게 만듭니다. 기본값은 **0**: 유효하지 않음.

보다 상세한 설명은 110 페이지의 "기본 PFM 스크립트: 시작하기"를 참조하십시오.

보다 상세한 설명은 119 페이지의 "함수가 다른 피크"를 참조하십시오.

데이터 집합의 일부 피팅

이 절에 소개되는 속성은 데이터 집합의 일부를 피팅하는 작업을 돕습니다. 데이터 집합의 일부는 범위입니다. 범위는 지정한 시작 및 끝 위치로 정의됩니다.

피팅 범위 - 속성

pf.dataBegin, **pf.dataEnd** 읽기/쓰기, 숫자. 이 두 속성은 피팅에 사용할 데이터 부분(범위)을 설정합니다. 이 값은 범위를 나타내는 첫 행과 끝 행 번호입니다. 그 사이의 데이터 점만 피팅됩니다. 기본값은 **1** 과 마지막 행 번호입니다.

주의: 속성 **pf.y\$**를 사용해서 피팅 데이터 집합을 할당하면 이 두 값은 기본값(전체 데이터 범위)으로 설정됩니다. 따라서 새 피팅 데이터를 할당한 다음, 항상 이 두 속성을 사용해서 원하는 피팅 범위를 설정해야 합니다.

pf.dataBeginX, **pf.dataEndX** 읽기/쓰기, 숫자. 이 두 속성은 피팅 범위를 행 번호가 아닌 X 값으로 나타낸다는 점을 제외하면 **pf.dataBegin** 및 **pf.dataEnd** 와 비슷합니다. 예를 들어, **pf.dataBeginX=20.55**; **pf.dataEndX=112.55**;는 PFM 에서 $X = 20.55$ 와 $X = 112.55$ 사이에서만 데이터 점을 피팅하도록 할 수 있습니다.

pf.dataStep 읽기/쓰기, 숫자. 데이터 점의 일부만 사용하는 경우, 증가 단계 크기로 정의되는 데이터 간격입니다. 데이터 점의 수가 매우 많은 상황에서 피팅을 대략적으로 추측해야만 하는 경우에 매우 유용한 기능입니다. 이 값이 1 이면 모든 데이터 점을 사용합니다. 이 값이 2 이면 데이터 점을 하나 건너 하나씩 사용하는 방식으로 계속 진행됩니다. 피팅에 스크립트를 사용하는 경우, 이 값의 기본값은 1 입니다.

pf.useRowNum 읽기/쓰기, 숫자. 이 값이 1 이면 피팅 데이터 범위를 나타낼 때 행 번호를 사용합니다. 그렇지 않으면, X 값을 사용합니다. 기본값은 1 입니다.

제한

매개변수 간에 관계가 있을 수 있습니다. 제한을 사용하면 이런 관계를 지정할 수 있습니다.

제한 - 속성

pf.constr\$ 읽기/쓰기, 문자열. 매개변수의 일반 선형 제한입니다. 예를 들어, **pf.constr\$ = "A_1=2*A_2;w_1=0.5*w_2"**는 피팅 중에 **A_1** 은 **A_2** 값의 두 배로 설정하고, **w_1** 은 **w_2** 값의 절반으로 설정합니다. 이 속성은 이전 제한을 대체합니다. 새 제한은 명확하게 제거할 때까지 남아 있습니다. 제한을 제거하려면 다음과 같이 빈 문자열을 사용합니다. **pf.constr\$=""**.

pf.lBoundn 읽기/쓰기, 숫자. 현재 피크(**pf.curPeak** 에서 주어집니다. 110 페이지의 "기본 PFM 스크립트: 시작하기"를 참조하십시오).

pf.lBoundOnn 읽기/쓰기, 숫자. 현재 피크(**pf.curPeak** 에서 주어집니다. 110 페이지의 "기본 PFM 스크립트: 시작하기"를 참조하십시오): 1 = 켜짐; 0 = 꺼짐.

pf.nConstr 읽기 전용, 숫자. 제한의 수입니다. 선형 제한은 내부의 **pf.nConstr** 에서 선형 등식의 수로 행렬-벡터 형식으로 해석 및 변환됩니다.

pf.nConstrEff 읽기 전용, 숫자. 유효한 제한의 수입입니다. 고정된 매개변수가 있는 경우, PFM 은 해당 매개변수를 제한 등식의 왼쪽에서 오른쪽으로 이동하여 등식에서 제거합니다. 그러면, 등식의 총 수가 줄어들 수 있습니다. 그 결과, 선형 제한 등식의 최종적인 수가 **pf.nConstr** 보다 작아져 **pf.nConstrEff** 에 해당될 수 있습니다.

pf.uBoundn 읽기/쓰기, 숫자. 현재 피크(**pf.curPeak** 에서 주어집니다. 110 페이지의 "기본 PFM 스크립트: 시작하기"를 참조하십시오).

pf.uBoundOnn 읽기/쓰기, 숫자. 현재 피크(**pf.curPeak** 에서 주어집니다. 110 페이지의 "기본 PFM 스크립트: 시작하기"를 참조하십시오): 1 = 켜짐; 0 = 꺼짐.

제한 - 메소드

pf.allEqual(cntrl, i) **pf.equal()**과 **pf.equal2()** 메소드를 참조하십시오. 이 메소드는 **pf.equal()** 및 **pf.equal2()**와 비슷하지만 모든 피크의 *i* 번째 매개변수에 적용됩니다. 예를 들어, **pf.allEqual(1, 3)**은 모든 피크가 같은 폭을 갖도록 설정합니다.

pf.chkConstr() 제한의 위반 여부를 확인합니다. 이 메소드는 제한이 자체 일관성을 갖는지 여부를 확인하는 작업을 돕습니다.

pf.equal(cntrl, i, j) 매개변수 증가 그룹을 설정합니다. 그룹 내의 모든 매개변수는 피팅 중에 같은 값을 갖습니다. 이 메소드는 증가 그룹에서 피크를 추가 또는 제거할 때 사용됩니다.

cntrl=0: *j* 번째 증가 그룹에서 *i* 번째 피크의 *j* 번째 매개변수를 제거합니다.

cntrl=1: *i* 번째 피크의 *j* 번째 매개변수를 *j* 번째 증가 그룹에 넣습니다.

cntrl=2: *i* 번째 피크의 *j* 번째 매개변수가 *j* 번째 증가 그룹에 있는지 확인합니다.

예를 들어, 이 메소드를 사용해서 피크 1, 2, 5 가 같은 폭을 갖게 만들 수 있습니다(피크 유형은 중요하지 않습니다). 폭은 피크 함수의 세 번째 매개변수이기 때문에 피팅 중에 세 피크가 같은 폭을 갖도록 증가 그룹에 세 피크의 폭을 넣을 때에는

pf.equal(1,1,3), pf.equal(1,2,3), pf.equal(1,5,3)을 사용합니다.

이 메소드에서는 하나의 매개변수 유형당 하나의 등가 그룹을 갖는다고 가정합니다(폭에 하나, 높이에 하나 등).

pf.equal2(cntrl, i, j, k) **pf.equal()** 메소드와 비슷합니다. 하지만, 이 메소드는 *i* 번째 피크와 *j* 번째 피크의 *k* 번째 매개변수에 적용됩니다. 이 메소드는 등가 그룹이 두 개 이상인 경우에 유용합니다. 예를 들어, **pf.equal2(1, 1, 3, 3)**와 **pf.equal2(1, 2, 4, 3)**를 사용해서 피크 2와 피크 4의 폭이 같아지고, 피크 1과 피크 3의 폭이 같아지도록 관계를 설정할 수 있습니다.

pf.paraRange() 매개변수를 존재하는 모든 제한을 충족시키는 영역으로 설정합니다.

pf.setConstr() 매개변수의 일반 선형 제한을 설정하는 **Set General Linear Constraints** 대화 상자를 엽니다. 예를 들어, 피팅 중에 **A_1**을 **A_2**의 두 배로 설정하려면 제한 **A_1=2*A_2**을 사용합니다.

부가 메소드 및 속성

다음 속성과 메소드는 사용자 정의 시스템의 설정을 도와줍니다. 여기에는 사용자 인터페이스의 속성과 메소드, 매개변수 초기화, 기타 유용한 작업이 포함됩니다.

사용자 정의 - 속성

pf.heightEstn 읽기/쓰기, 숫자. 피크 *n*의 최대 위치 추정 값입니다. 이 값은 절대 0에서 피크 최대 위치까지의 거리를 나타냅니다. 피크 높이와 중간 점이 주어지면 **pf.peakGuess()** 메소드로 매개변수 초기화를 수행할 수 있습니다.

pf.msgPrompt 읽기/쓰기, 숫자. 오류 메시지 박스를 켜고 끕니다. 기본값은 1: 오류 메시지 박스 켜짐. 직접 응용 프로그램을 개발하는 경우에는 문제가 있을 때마다 오류 메시지 박스가 표시되는 것을 원치 않을 수도 있습니다. 대신 **pf.err** 속성을 사용하면 무엇이 발생했는지를 확인할 수 있습니다.

보다 상세한 설명은 114 페이지의 "결과 가져오기"를 참조하십시오.

pf.nFPoints 읽기/쓰기, 숫자. 함수 그림 **FitFunc_fit** 와 **FitFunc_fn** 를 만들 때 사용되는 점의 수입니다.

사용자 정의 - 메소드

pf.addBase(cntrl) 이 메소드는 피팅 데이터 집합에서 기저선을 빼거나, 뺀 기저선이 있는 경우 다시 추가합니다.

cntrl=0: 피팅 데이터 집합에서 기저선을 뺍니다.

cntrl=1: 기저선을 다시 추가합니다.

pf.adjustBase(cntrl, xData, yData, value) 기저선 높이를 조정합니다. (**xData, yData**)는 특성 기저선입니다.

cntrl=0: 데이터 집합 **yData** 의 평균 Y 값을 반환합니다.

cntrl=1: 데이터 집합 **yData** 가 평균 높이 값을 갖도록 조정하고 이 변경 사항이 반영되게 해당 오프셋 매개변수를 수정합니다.

cntrl=2: 데이터 집합 **yData** 가 평균 높이 값을 갖도록 조정합니다.

pf.dispCurve(cntrl, n) 현재 매개변수 값으로 함수 그림을 표시합니다.

cntrl=A: **n** 번째 피크의 함수 그림 **FitFunc_fn** 을 현재 레이어에 추가합니다.

cntrl=R: 현재 레이어에서 **FitFunc_fn** 을 제거합니다.

n = -1 이면, 이 메소드는 모든 피크에서 함수를 추가 또는 제거합니다.

pf.integrate() 피팅 데이터와 기저선 사이의 영역을 구합니다.

pf.make(cntrl, xMode, n, xData, yData, nPoints, x1, x2) 이 메소드는 함수 데이터 집합, 또는 신뢰대/예측 밴드를 만듭니다. 이 메소드에는 여덟 개의 인수가 있습니다. 첫 두 인수 **cntrl** 과 **xMode** 에 따라 이 인수들 중 일부를 무시할(따라서 비워 둘) 수 있습니다.

cntrl: 수행할 작업을 결정합니다.

C: 신뢰대를 만듭니다. **yData** 인수를 비워 둡니다. 밴드를 내부에 저장할 수 있는 **FitFunc_LConf** 및 **FitFunc_UConf** 데이터 집합이 생성됩니다.

P: 예측 밴드를 만듭니다. **yData** 인수를 비워 둡니다. 밴드를 내부에 저장하는 **FitFunc_LPred** 및 **FitFunc_UPred** 데이터 집합이 생성됩니다.

B: 신뢰대와 예측 밴드를 모두 만듭니다. **yData** 인수를 비워 둡니다.

F: 유효한 피크가 모두 포함된 함수 집합을 만듭니다.

G: 현재 피크(pf.curPeak 에서 주어집니다. 97 페이지의 "기본 PFM 스크립트: 시작하기"를 참조하십시오).

H: 현재 피크(pf.curPeak 에서 주어진)의 기저선이 추가된 함수 집합을 만듭니다.

xMode: X 값을 사용해서 데이터 집합을 만드는 방법을 결정합니다.

0: 피팅할 데이터 집합의 X 값을 사용합니다. **xData**, **nPoints**, **x1**, **x2** 인수를 비워 둡니다.

1: **nPoints**, **x1**, **x2** 를 기준으로 데이터 집합을 생성합니다. **x1** 은 X 시작 값이고 **x2** is 는 X 증가 단계 크기입니다. **xData** 인수를 비워 둡니다.

2: 주어진 X 데이터 집합 **xData** 에 따라 데이터 집합을 생성합니다. 이 작업을 시작하기 전에 **xData** 가 있어야 합니다. **nPoints**, **x1**, **x2** 인수를 비워 둡니다.

3: X 값이 고르게 위치한 데이터 집합을 생성합니다. 처음과 마지막 X 값은 피팅 데이터 집합의 것과 같으며, 점의 총 수는 **nPoints** 개입니다. 각 점 쌍 사이의 간격은 $(x2-x1)/(nPoints-1)$ 입니다. **xData**, **x1**, **x2** 인수를 비워 둡니다.

4: 화면의 X 방향으로 고르게 분포한 데이터 집합을 생성합니다. 이 작업은 X 축 스케일을 설정한 후에 수행합니다. 하지만 X 상의 실제 간격은 고르지 않습니다. 이 작업의 결과로 화면 상에서 고르게 보이는 커브가 생성됩니다. 처음과 마지막 X 값은 피팅 데이터 집합의 처음 및 마지막 값과 같으며 데이터 집합 **xData** 와 **yData** 에 있는 점의 총 수는 **nPoints** 쌍입니다. **x1** 및 **x2** 인수를 비워 둡니다.

5: 처음 X 값이 **x1** 이고 마지막 X 값이 **x2** 라는 점을 제외하면 위와 같습니다.

n: **cntrl** = F 일 때 이 값은 생성할 데이터 집합을 결정합니다. 그렇지 않으면, **n** 은 생성할 함수를 나타냅니다. **n** 은 0 - **pf.nPeaks** 사이에 있어야 합니다. 보다 상세한 설명은 110 페이지의 "기본 PFM 스크립트: 시작하기"를 참조하십시오.

xData: 함수 데이터 집합의 X 열입니다. 경우에 따라, 위의 설명과 같이 무시할 수도 있습니다.

yData: 함수 데이터 집합의 Y 열입니다. 경우에 따라, 위의 설명과 같이 무시할 수도 있습니다.

nPoints: 생성할 점의 총 수입니다. 경우에 따라 위의 설명과 같이 무시할 수도 있습니다.

x1: 시작 X 값입니다. 경우에 따라, 위의 설명과 같이 무시할 수도 있습니다.

x2: 단계 크기 또는 마지막 X 값입니다. 경우에 따라, 위의 설명과 같이 무시할 수도 있습니다.

예제:

pf.make(g, 5, 1, , fitfunc, 100, ,);는 점이 100 개이며 피팅 데이터의 X 값에 해당하는 피크 1의 함수 데이터 집합 **fitfunc**를 만듭니다.

pf.make(c, 6, 1, bands_x, , 100, 0.0, 1000.0);는 밴드 커브가 (**bands_x, FitFunc_LConf**)와 (**bands_x, FitFunc_UConf**)인 신뢰대를 만듭니다.

pf.makeBase(xData, yData, n) 기저선으로 임의의 선을 그리면 (**pf.bType = 12** 및 **pf.bType = 13**), 이 메소드는 기저선 데이터 집합에 있는 *n* 개의 점을 사용해서 사용자가 그린 선(**xData, yData**)을 실제 계산에 사용되는 기저선 데이터 집합(**baseLine_a, baseLine**)으로 변환합니다. 이 데이터 집합(**baseLine_a, baseLine**)을 다른 목적으로 사용해서는 안 됩니다. **pf.bColX\$** 및 **pf.bColY\$** 속성을 사용해서 기저선 데이터 집합을 할당하면 데이터 집합을 변경할 수 있습니다. 보다 상세한 설명은 110 페이지의 "기본 PFM 스크립트: 시작하기"를 참조하십시오.

pf.makeCurve(cntrl, n) 현재 매개변수 값으로 함수 그림을 만듭니다.

cntrl=g: *n* 번째 피크에 대해 이름이 **FitFunc_fn**인 함수 그림(기저선이 없는)을 만듭니다.

cntrl=h: *n* 번째 피크에 대해 이름이 **FitFunc_fn**인 함수 그림(기저선이 있는)을 만듭니다.

cntrl=f: 모든 함수와 기저선이 있으며 이름이 **FitFunc_fit**인 피팅 커브를 만듭니다.

cntrl=c: 피팅 커브 **FitFunc_fit**에 대해 신뢰대(**FitFunc_lconf, FitFunc_uconf**)를 만듭니다. *n* = 1을 사용합니다.

cntrl=p: 피팅 커브 **FitFunc_fit**에 대해 예측 밴드(**FitFunc_lpred, FitFunc_upred**)를 만듭니다. *n* = 1을 사용합니다.

n = -1이면, 이 메소드는 모든 피크에 대해 함수 그림을 만듭니다.

pf.paralnit(n, xData, yData) 데이터 집합(**xData, yData**)이 주어졌을 때 이 메소드를 사용하면 피크 *n*의 매개변수를 신속하게 결정할 수 있습니다. *n*=0이면 이 메소드는 기저선에 적용됩니다. 일반적으로, *nPara* 매개변수를 사용해서 함수의 매개변수를 결정하는 경우 *nPara* 쌍의 XY 값만이 필요합니다. PFM은 그에 따라 매개변수 값을 찾거나 근사 처리합니다. **xData** 및 **yData**에 *nPara* 개보다 많은 점이 있는 경우에도 사용되는 것은 첫 *nPara* 쌍뿐입니다. 이 메소드를 이용해서 매개변수의 시작 추정 값을 찾을 수 있습니다. 이 메소드는 *nPara* 개의 점이 있는 선을 그려서 실제 함수에 근사 처리한 경우에 유용합니다.

pf.peakGuess(option, i, n) 매개변수 초기화를 수행합니다.

option = P: 두 개 이상의 피크 또는 기저선에 대한 예측 작업을 수행합니다.

option = S: 한 개의 피크 또는 기저선에 대해 예측 작업을 수행합니다.

i = 0: 모든 피크와 기저선에 대해 예측 작업을 수행합니다.

i = 1: 모든 피크에 대해 예측 작업을 수행합니다. 기저선에 대한 예측 작업은 수행하지 않습니다.

n: 피크의 수입니다.

pf.plotBase(cntrl, xData, yData) 이 메소드는 기저선 함수의 매개변수에 따라 기저선 매개변수와 동일한 수의 점을 가지고 기저선 데이터 집합(**xData, yData**)을 만듭니다.

cntrl=0: 데이터 집합(**xData, yData**)을 현재 레이어에 넣습니다.

cntrl=1: 데이터 집합(**xData, yData**)을 만듭니다.

cntrl=2: 데이터 집합(**xData, yData**)을 만들고 **xData** 값을 고르게 설정합니다.

cntrl=3: 데이터 집합(**xData, yData**)을 만들고 **xData**와 **yData** 값을 모두 설정합니다.

cntrl=4: **yData**의 값을 설정합니다.

pf.plotChar(i, xData, yData, cntrl) **n** 매개변수가 있는 각 함수에서 **n** XY 점은 매개변수를 일반적으로 결정할 수 있습니다. 이 점은 함수의 특성 점입니다. 이 메소드는 피크 **i**의 함수에 대해 이러한 점들의 값을 계산합니다.

cntrl=1: 피팅 데이터 집합에 따라 **n** X 값을 고르게 만든 후 그에 따라 **n** Y 값을 생성합니다. X 값을 데이터 집합 **xData**에 넣고 Y 값을 **yData**에 넣습니다.

cntrl=0: **xData**에 X 값을 입력하면, Y 값은 X에 따라 계산됩니다. 그리고 현재 레이어에 **yData**가 빨간색으로 채운 원 기호로 표시됩니다. 이 커브의 점은 Origin 매크로 **mvpts**를 사용해서 이동할 수 있습니다. Script 창에서 다음을 입력하면 이 매크로에 액세스할 수 있습니다.

mvpts WorksheetName_Col (ENTER).

pf.simplex(n) **n** Simplex 반복 작업을 수행합니다. 반복 작업에서는 지정한 반복 작업에 따라 간단한 메소드를 사용해서 매개변수를 찾습니다. 처음에 매개변수를 추측할 방법이 없으면, Simplex 메소드를 사용해서 초기화한 후 논리적인 방법으로 추측해

됩니다. Simplex 메소드를 사용하는 경우에는 보통 최소값에 도달할 때까지 필요한 함수 평가가 더 많아집니다.

여러 데이터 집합의 동시 피팅

동시에 여러 데이터 집합을 피팅하도록 PFM 을 구성할 수 있습니다. 이 기능을 사용하면 서로 관련된 데이터 집합의 그룹을 분석할 수 있습니다. **pf.nData** 속성을 사용해서 PFM 에 피팅할 데이터 집합의 수를 알리는 것으로 작업을 시작합니다. 그 후에 다른 속성을 사용해서 데이터 집합 이름과 기타 매개변수를 할당할 수 있습니다.

속성

pf.curData 읽기/쓰기, 숫자. 작업할 현재 데이터 집합입니다. (**pf.nData** 를 1 보다 큰 값으로 설정한 경우)

pf.dataBeginn, **pf.dataEndn** 읽기/쓰기, 숫자. **pf.dataBegin** 및 **pf.dataEnd** 와 비슷한 두 속성입니다(120 페이지의 "데이터 집합의 일부 피팅"을 참조하십시오). 이 두 속성은 n 번째 데이터 집합의 피팅 범위를 설정합니다. **pf.dataBegin** 과 **pf.dataEnd** 를 사용하는 경우에는 모든 데이터 집합에 대해 범위가 설정됩니다. 각 데이터 집합에 다른 범위를 설정하려면 **pf.dataBeginn** 과 **pf.dataEndn** 을 사용해야 합니다.

pf.dataBeginXn, **pf.dataEndXn** 읽기/쓰기, 숫자. **pf.dataBeginX** 및 **pf.dataEndX** 와 비슷합니다(120 페이지의 "데이터 집합의 일부 피팅"을 참조하십시오). 이 속성들은 n 번째 데이터 집합의 피팅 범위를 설정합니다. 범위 표시에는 행 번호보다 X 값을 더 많이 사용합니다. **pf.dataBeginX** 와 **pf.dataEndX** 를 사용하면 모든 데이터 집합에 범위가 설정됩니다.

pf.dataPointsn 읽기/쓰기, 숫자. n 번째 데이터 집합에 사용되는 데이터 점의 수입니다.

pf.dataStepn 읽기/쓰기, 숫자. n 번째 데이터 집합의 단계 크기입니다. 기본값은 1 입니다.

pf.dataWeight n 읽기/쓰기, 숫자. 전체 피팅 프로세스에서 n 번째 데이터 집합의 가중치입니다. 이 속성을 사용하면 계산을 수행할 때 각 데이터 집합의 기여도를 지정할 수 있습니다. 기본값은 1.0 입니다.

pf.nData 읽기/쓰기, 숫자. 피팅할 데이터 집합의 총 수입니다. 기본값은 1 입니다. 대부분의 경우 피팅할 데이터 집합은 하나 뿐입니다. 따라서, 이 속성은 거의 사용되지 않습니다. 하지만, 여러 데이터 집합을 함께 피팅할 필요가 있는 경우에는 이 값을 사용해야 합니다.

pf.SSR n 읽기 전용, 숫자. n 번째 데이터 집합에 해당하는 Sun of Squares 값입니다. **pf.SSR** 속성을 사용해서 Sum of Squares 의 전체 값을 가져올 수 있습니다. 보다 상세한 설명은 114 페이지의 "결과 가져오기"를 참조하십시오.

pf.wn\$ 읽기/쓰기, 문자열. n 번째 데이터 집합에 가중치를 할당합니다. 데이터 집합에 가중치를 할당하는 작업에 관한 자세한 내용은 **pf.w\$** 속성을 참조하십시오(110 페이지의 "기본 PFM 스크립트: 시작하기"를 참조하십시오).

pf.wType n 읽기/쓰기, 숫자. n 번째 데이터 집합에 사용되는 가중치 설정 메소드입니다. 기본값은 0 입니다. 모든 데이터 집합에 가중치 유형을 할당하려면 **pf.wType** 속성을 사용합니다. 가중치 유형에 관한 내용은 **pf.wType** 속성을 참조하십시오(110 페이지의 "기본 PFM 스크립트: 시작하기"를 참조하십시오).

pf.xn\$ 읽기/쓰기, 문자열. X 데이터 집합을 n 번째 데이터 집합에 할당합니다. X 데이터 집합 설정에 관한 자세한 내용은 **pf.x\$** 속성을 참조하십시오((110 페이지의 "기본 PFM 스크립트: 시작하기"를 참조하십시오).

pf.yn\$ 읽기/쓰기, 문자열. Y 데이터 집합을 n 번째 데이터 집합에 할당합니다. Y 데이터 집합 할당에 관한 자세한 내용은 **pf.y\$** 속성을 참조하십시오(110 페이지의 "기본 PFM 스크립트: 시작하기"를 참조하십시오).

색인

개별 피팅 곡선, 69
결정 계수, 89
기저선
 초기화, 50
기저선
 빼기, 55
 전환, 55
 점 수정, 53
 조건 설정, 54
 피팅 함수 선택, 53
단축 메뉴
 Peak Fitting 마법사, 42
데이터
 선 또는 분산 그림으로
 표시, 46
데이터
 선택, 44
 범위, 45
스무딩, 49
시작 매개변수, 47
오프셋 빼기, 48
피크 찾기, 63
피크 함수 선택, 56, 57, 68
데이터 가중 처리, 76
데이터 스무딩, 49
데이터 필터링, 49
마법사 그래프 확대, 64
마법사 맵
 숨기기, 43
매개변수
 고정, 71
 공유, 72
 신뢰 구간, 81
 일반 선형, 73
 제한, 71, 72
 상한 및 하한, 72
 초기, 68
 표준 오류, 81
 피팅 결과 보고, 79, 88
미분
 이차 미분 표시, 65
반복, 74

분산
 피팅 곡선, 83
분산 데이터 그림
 피크 데이터, 46
뷰 모드, 42
비대칭 이중 시그모이달 함수,
 99
비대칭 **Gaussian** 함수, 103
사각 쌍곡선 함수, 108
상관 계수, 81
상한
 매개변수 제한, 72
상한 및 하한
 매개변수 제한, 72
선 데이터 그림
 피크 데이터, 46
선형 제한, 73
수동 작업 모드, 43
숨겨진 피크, 65, 77
스큐잉
 피팅 곡선, 84
스크립트
 PFM 프로그래밍, 110
스크립트 파일
 Peak Fitting 마법사, 43
스플라인
 기저선 선 연결, 54
시작 매개변수 데이터, 47
신뢰, 81
신뢰 구간
 매개변수, 81
신뢰 밴드, 75
신뢰 수준, 75
에러 값
 데이터 가중처리, 76
에러바 열을 이용하는
 방법(**Instrumental**
 weights):, 76
역 다항 함수, 103
예측 밴드, 75
오프셋 빼기, 48
이차 미분, 65

- 인접 평균, 50
- 일반 선형 제한, 73
- 자유도, 81, 89
- 작업 모드, 43
- 잔류값, 77
- 전체 뷰 모드, 42
- 제한된 값의 합, 89
- 제한된 값의 합, 81
- 제한, 71, 72
 - 상한 및 하한, 72
- 일반 선형, 73
- 지수 함수로 수정된
 - Gaussian 함수, 96
- 초기화 파일, 43
- 축소 카이제곱 값, 81, 89
- 카이제곱 값, 89
- 통계적
 - 피팅, 88
 - 피팅에서, 79, 82
- 통계적 가중치, 76
- 표준 오류
 - 매개변수, 81
- 피크 데이터
 - 선 또는 분산 그림으로 표시, 46
 - 선택, 44
 - 범위, 45
 - 숨겨진 피크 찾기, 65, 77
 - 스무딩, 49
 - 시작 매개변수, 46
 - 오프셋 빼기, 48
 - 이차 미분 표시, 65
 - 피크 찾기, 63
 - 피크 추가 및 삭제, 64
 - 피크 추가 및 삭제, 65, 66
 - 함수 선택, 56, 57, 68
 - 확대, 64
- 피크 무게 중심
 - 피팅 곡선, 83
- 피크 분산
 - 피팅 곡선, 83
- 피크 스튜잉
 - 피팅 곡선, 84
- 피크 영역
 - 피팅 곡선, 83
- 피크 익스세스
 - 피크 익스세스 곡선, 84
- 피크 최대값

- 피팅 곡선, 83
- 피크 피팅 마법사
 - 결과, 88
- 피팅, 74
 - 가중 처리 방법, 76
 - 결과, 79, 82, 88
 - 반복 횟수, 74
 - 신뢰 수준, 75
 - 잔류값, 77
 - 허용 범위, 75
- 피팅 곡선
 - 피크 익스세스, 84
- 피팅 곡선
 - 개별 피크에 대해 표시, 69
 - 매개변수 고정, 71
 - 매개변수 공유, 72
 - 초기 매개변수, 68
 - 피크 무게 중심, 83
 - 피크 분산, 83
 - 피크 스튜잉, 84
 - 피크 영역, 83
 - 피크 최대값, 83
- 피팅 함수
 - 기저선, 53
- 피팅 함수
 - 외부 DLL, 108
 - 정의, 58
 - 컨볼루션, 61
 - Asym2Sig, 99
 - BiGauss, 103
 - CCE, 102
 - Cubic, 106
 - ECS, 102
 - EMGauss, 96
 - ExpDec1, 107
 - ExpDec2, 107
 - ExpGrow1, 107
 - ExpGrow2, 108
 - Gauss2, 96
 - Gaussian, 96
 - GCAS, 100
 - Hyperbl, 108
 - InvsPoly, 103
 - Line, 106
 - logNormal, 100
 - Lorentz, 97
 - parabola, 106
 - Pearson7, 99
 - Poly4, 107
 - Poly5, 107

- Power2, 104
- PSVoigt1, 98
- PSVoigt2, 98
- Pulse, 104
- Sine, 105
- SineDamp, 105
- SineSqr, 106
- Voigt, 97
- Weibull3, 100
- 하한
 - 매개변수 제한, 72
- 함수의 컨볼루션, 61
- 허용 범위, 75, 82
- Asym2Sig 함수, 99
- BiGauss 함수, 103
- CCE 함수, 102
- Chesler-Cram 등식, 102
- Chi-square, 81
- Coefficient of determination, 81
- Cubic 함수, 106
- DLL
 - 외부 DLL 피팅 함수, 108
- ECS 함수, 102
- Edgeworth-Cramer Series 함수, 102
- EMGauss 함수, 96
- ExpDec1 함수, 107
- ExpDec2 함수, 107
- ExpGrow1 함수, 107
- ExpGrow2 함수, 108
- FFT 필터 스무딩, 50
- Fitting, 76
- Gauss2 함수, 96
- Gaussian 함수, 96
- GCAS 함수, 100
- Gram-Charlier A-Series 함수, 100
- Hyperbl 함수, 108
- 설치
 - PFM, 7
- InvsPoly 함수, 103
- LabTalk
 - PFM 프로그래밍, 110
- Levenberg-Marquardt 반복, 74
- Line 함수, 106
- LogNormal 함수, 100
- Lorentz 함수, 97
- Parabola 함수, 106

- Peak Fitting 마법사
 - 개별 피팅 곡선 표시, 69
 - 개요, 40
 - 결과, 79, 82
 - 기저선 빼기, 55
 - 기저선 조건 설정, 54
 - 기저선 조정, 55
 - 기저선 초기화, 50
 - 단축 메뉴, 42
 - 데이터 선택, 44
 - 마법사 그래프 확대, 64
 - 마법사 맵 숨기기, 43
 - 뷰 모드, 42
 - 숨겨진 피크 찾기, 65, 77
 - 스크립트 파일, 43
 - 시작 매개변수 데이터, 46
 - 이차 미분 표시, 65
 - 작업 모드, 43
 - 잔류값, 77
 - 제한 설정, 71, 72
 - 초기 매개변수, 68
 - 초기화, 43
 - 피크 찾기, 63
 - 피크 추가 및 삭제, 64, 65, 66
 - 피크 함수, 56, 57, 68
 - 피팅, 74
- Peak Fitting wizard fitting, 76
- 이동, 10
- Peak Fitting 마법사
 - 마법사 맵, 10
- Pearson7 함수, 99
- PFM. Peak Fitting 마법사
 - 참조
 - 설치, 7
 - LabTalk 으로 프로그래밍, 110
 - 시작, 9
 - 제거, 8
 - , 8
- PFM 프로그래밍, 110
- Poly4 함수, 107
- Poly5 함수, 107
- Power2 함수, 104
- Pseudo-Voigt 함수, 98
- PSVoigt1 함수, 98
- PSVoigt2 함수, 98

Pulse 함수, 104
Savitsky-Golay 스무딩, 49
Shirley 기저선 빼기, 48
Sine 함수, 105
SineDamp 함수, 105
SineSqr 함수, 106
Tougaard 기저선 빼기, 48

제거
PFM, 8
, 8
Voigt 함수, 97
Weibull3 함수, 100