

プログラム実習 (0クラス)

荒井研 助教 丸山武男



Tokyo Institute of Technology



QNERC
Quantum Nanoelectronics
Research Center

最小2乗法とは

———例えば———

ある物理学実験から、データが得られたとする。
もしこのデータが、どのような法則(関数)によっ
てあらわされるか知らないとしたら、実験で扱っ
た現象を物理学で扱うためにも、どのような法則
があるのか知りたい。

そこで用いる方法の1つが最小2乗法である。
実験等で得られたデータをある関数で表せると予
想し、誤差の評価等に使う方法です。



最小2乗法とは

■ 実験データ

$$x_1, x_2, x_3, \dots, x_{n-1}, x_n$$

$$z_1, z_2, z_3, \dots, z_{n-1}, z_n$$

が得られていたとする。

この「 x と z の関係」に多項式(今回は1次式)

$$x = az + b$$

をあてはめて実験公式を作る、という問題を考える。



最小2乗法とは

実験データには誤差があるから、ほとんどは

$$x(z_i) \neq x_i$$

となる。

そこで、その食い違いの2乗和

$$\sum_{i=1}^N (x_i - az_i - b)^2 \quad (3.1)$$

が最小となるように、係数 a , b を決める。

最小2乗法



最小2乗法とは

具体的には(3.1)式の、極大極小の条件(微分して0)を連立方程式として a, b について解く。

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^N (x_i - az_i - b)^2 \\ &= \sum_{i=1}^N x_i^2 + \left(\sum_{i=1}^N z_i^2 \right) a^2 + Nb^2 - 2 \left(\sum_{i=1}^N x_i z_i \right) a + 2 \left(\sum_{i=1}^N z_i \right) ab - 2 \left(\sum_{i=1}^N x_i \right) b \end{aligned}$$

上式を a, b で微分して0とする。

$$\left(\sum_{i=1}^N z_i^2 \right) a + \left(\sum_{i=1}^N z_i \right) b - \sum_{i=1}^N x_i z_i = 0$$

$$\left(\sum_{i=1}^N z_i \right) a + Nb - \sum_{i=1}^N x_i = 0$$



最小2乗法とは

a, b についてまとめると、

$$a = \frac{N \sum_{i=1}^N x_i z_i - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right) \left(\sum_{i=1}^N z_i \right)}{N \sum_{i=1}^N z_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N z_i \right)^2} \quad (3.2)$$

$$b = \frac{\left(\sum_{i=1}^N x_i \right) \left(\sum_{i=1}^N z_i^2 \right) - \left(\sum_{i=1}^N x_i z_i \right) \left(\sum_{i=1}^N z_i \right)}{N \sum_{i=1}^N z_i^2 - \left(\sum_{i=1}^N z_i \right)^2} \quad (3.3)$$

となり、これを用いて $x = az + b$ が求まる





Tokyo Institute of Technology

2007/10/2 プログラム実習(OKラス)
7



QNERC
Quantum Nanoelectronics
Research Center

```
$ mkdir prac2
$ cd prac2
$ cp ~yamasita/prac2/*.java .
$ javac *.java
$ java MainProg
```

次回、11月6日13:20

