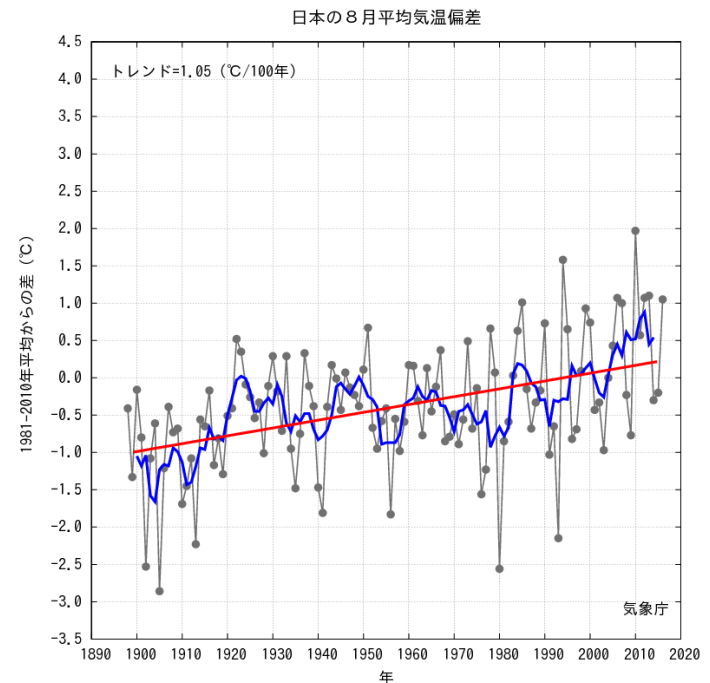


いまさら Fortran 入門

はじめに

- 今後の実験や実習では、取得したデータを様々な方法で処理することになるだろう。
- 今回は、これまでに学んだ命令を組み合わせて簡単なデータ処理を行ってみよう。
 - 平均, 分散, 標準偏差の計算
 - 移動平均 (右図の青線)
 - 最小二乗法による直線フィッティング (例えば右図の赤線)



http://www.data.jma.go.jp/cpdinfo/temp/an_jpn.html
downloaded at 2016/10/01.

復習：平均, 分散, 標準偏差

- 下のようないデータがあるとする.

$$(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)$$

– 平均 $\bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i$

– 分散 $\sigma^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2$

- 標準偏差は σ

移動平均

- 下のようなデータがあると
する。

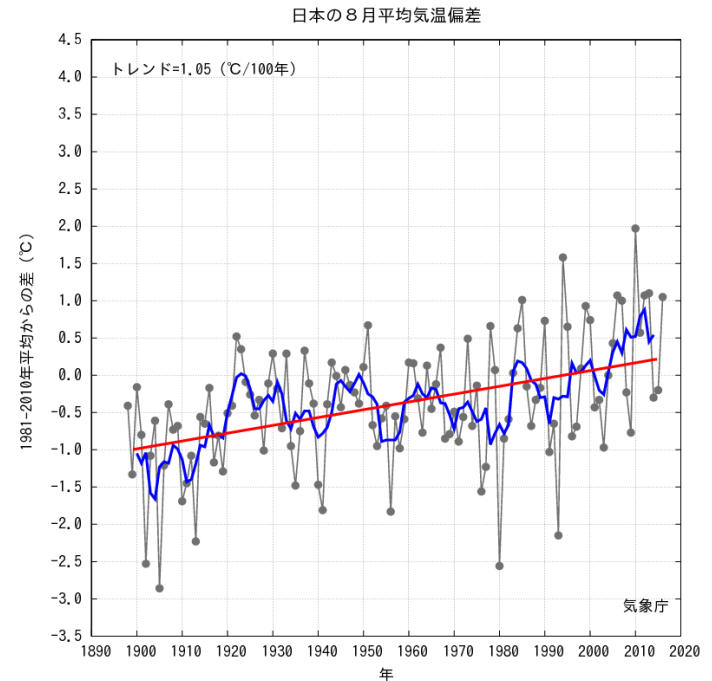
$$(x_1, y_1), (x_2, y_1), \dots, (x_N, y_N)$$

- 大規模な変化のみを取り出す方法として、しばしば移動平均が用いられる。

– 移動平均では、ある区間ごとに平均を求める。

$$(\bar{x}_1, \bar{y}_1), (\bar{x}_2, \bar{y}_2), \dots, (\bar{x}_{N/n}, \bar{y}_{N/n})$$

$$\bar{x}_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \quad \bar{y}_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i$$



http://www.data.jma.go.jp/cpdinfo/temp/an_jpn.html
downloaded at 2016/10/01.

青線は5年間の移動平均の結果

最小二乗法

概要 (1)

- 下のようなデータがあるとする.

$$(x_1, y_1), (x_2, y_1), \dots, (x_N, y_N)$$

- そして, これらの各データ, y_i , の分散 (誤差) が下のように書けるとする.

$$\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N$$

- このとき, このデータに対して, 下の関数をフィッティングすることを考えよう.

$$y = f(x)$$

最小二乗法

概要 (2)

- 「フィッティングする」とは、言うなれば「よく合っているようにする」ことである。
- 「よく合っている」の基準の一つは、二乗誤差が小さいことである。
 - つまり、下の値が最小となれば「よく合っている」だろう。

$$E = \sum_{i=1}^N \left(\frac{y_i - f(x_i)}{\sigma_i} \right)^2$$

- 二乗誤差が極小となるのは、その微分がゼロになるときである。この条件を基に、 $y = f(x)$ を求めればよい。

最小二乗法 一次関数 (1)

- ここから先は, 具体的な例を使って考える.
- フィッティングしたい関数が一次関数の時を考える.

$$y = ax + b$$

- 二乗誤差は下のようになる.

$$E = E(a, b) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{y_i - ax_i - b}{\sigma_i} \right)^2$$

- そして, 一次関数の係数を, 下の条件を基に決めればよい.

$$\frac{\partial E(a, b)}{\partial a} = 0 \qquad \frac{\partial E(a, b)}{\partial b} = 0$$

最小二乗法 一次関数 (2)

- 先の式より, 下のような, a, b の連立方程式となる.

$$\begin{aligned}\frac{\partial E(a, b)}{\partial a} &= - \sum_{i=1}^N \frac{2x_i}{\sigma_i} \left(\frac{y_i - ax_i - b}{\sigma_i} \right) \\ &= 2a \sum_{i=1}^N \frac{x_i^2}{\sigma_i^2} + 2b \sum_{i=1}^N \frac{x_i}{\sigma_i^2} - 2 \sum_{i=1}^N \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2} = 0\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial E(a, b)}{\partial b} &= - \sum_{i=1}^N \frac{2}{\sigma_i} \left(\frac{y_i - ax_i - b}{\sigma_i} \right) \\ &= 2a \sum_{i=1}^N \frac{x_i}{\sigma_i^2} + 2b \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} - 2 \sum_{i=1}^N \frac{y_i}{\sigma_i^2} = 0\end{aligned}$$

最小二乗法 一次関数 (3)

- 先の式は, a, b に関する連立一次方程式であるから, a, b は下のよう求められる.

$$a = \frac{\left(\sum_{i=1}^N \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2}\right) \left(\sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2}\right) - \left(\sum_{i=1}^N \frac{x_i}{\sigma_i^2}\right) \left(\sum_{i=1}^N \frac{y_i}{\sigma_i^2}\right)}{\left(\sum_{i=1}^N \frac{x_i^2}{\sigma_i^2}\right) \left(\sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2}\right) - \left(\sum_{i=1}^N \frac{x_i}{\sigma_i^2}\right)^2}$$

$$b = \frac{\left(\sum_{i=1}^N \frac{x_i^2}{\sigma_i^2}\right) \left(\sum_{i=1}^N \frac{y_i}{\sigma_i^2}\right) - \left(\sum_{i=1}^N \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2}\right) \left(\sum_{i=1}^N \frac{x_i}{\sigma_i^2}\right)}{\left(\sum_{i=1}^N \frac{x_i^2}{\sigma_i^2}\right) \left(\sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2}\right) - \left(\sum_{i=1}^N \frac{x_i}{\sigma_i^2}\right)^2}$$

実習へ

- 実習で自分でプログラムを書き,
 - 平均, 分散, 標準偏差を計算してみよう
 - 移動平均してみよう
 - 最小二乗法を使って一次関数を求めてみよう.