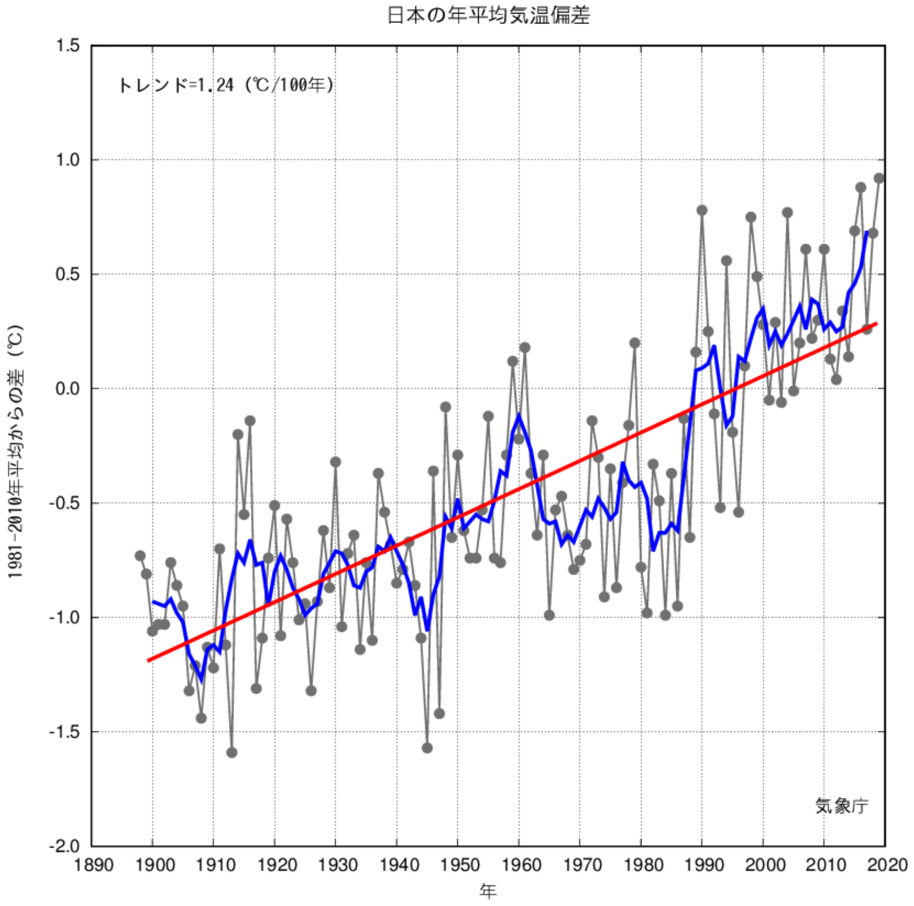
Fortran 入門

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.
- これまでに学んだ命令を組み合わせてデータ解析しよう.
  - 平均, 分散, 標準偏差, 共分散の計算
  - 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）
  - 移動平均（右図の青線）



http://www.data.jma.go.jp/cpdinfo/temp/an_jpn.html
2020/01/07 にダウンロードしました.

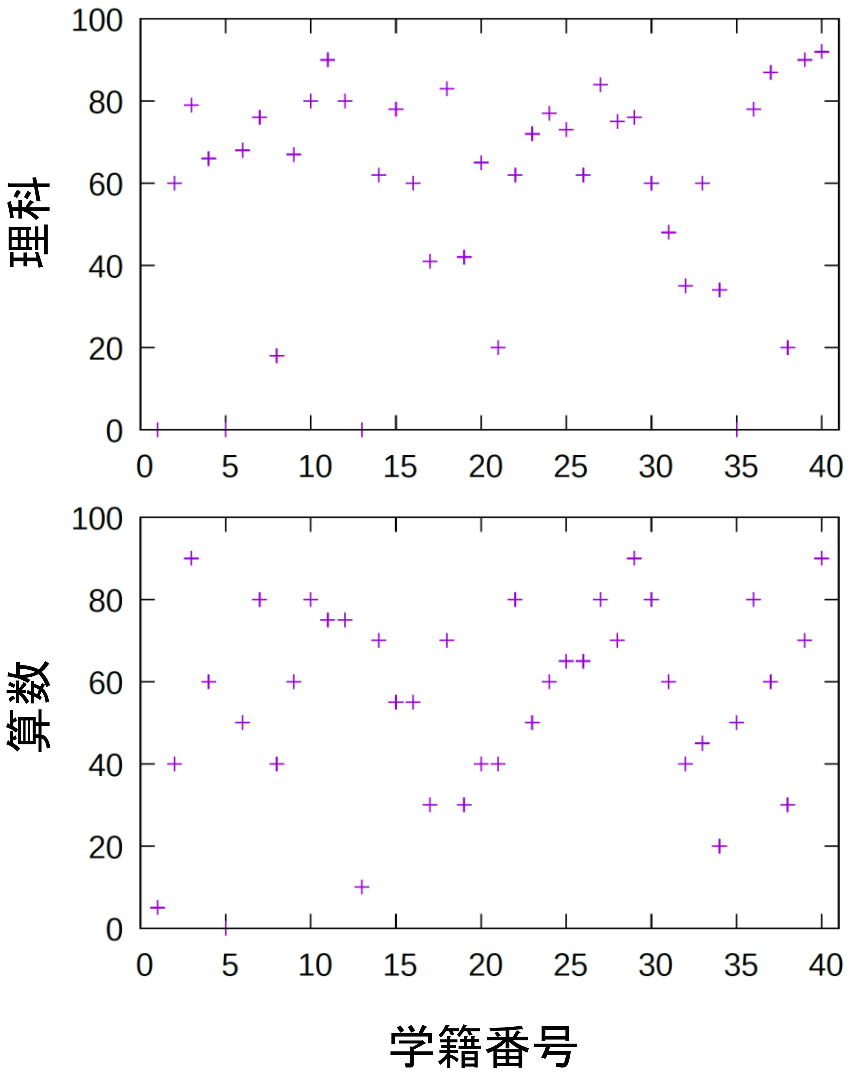
復習：統計処理

- 下のようなデータがあるとする.
  - 例: 〇〇小学校〇年〇組のテストの点数

学籍番号	x: 理科	y: 算数
01	60	40
02	79	90
03	66	60
…	…	…
N	92	90

復習：統計処理

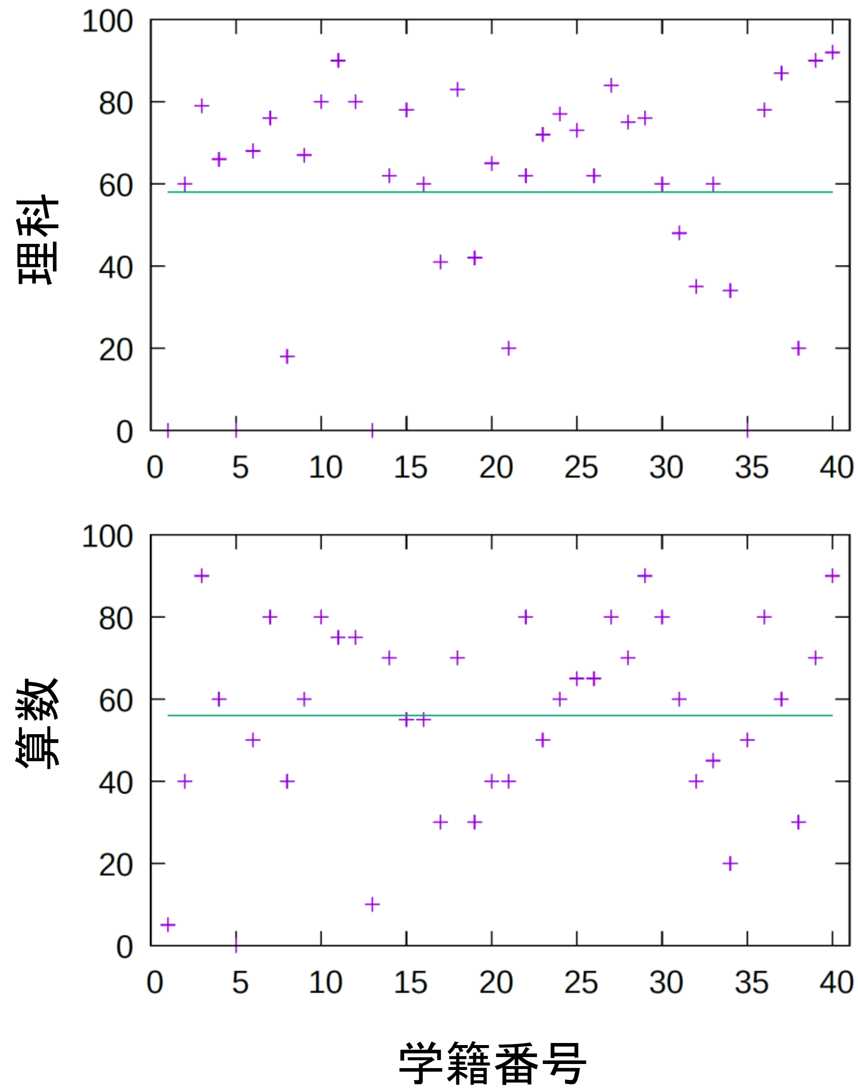
学籍番号	x: 理科	y: 算数
01	60	40
02	79	90
03	66	60
…	…	…
N	92	90



復習：平均

- 平均 (average, mean)

$$\bar{x} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i$$



復習：分散, 標準偏差

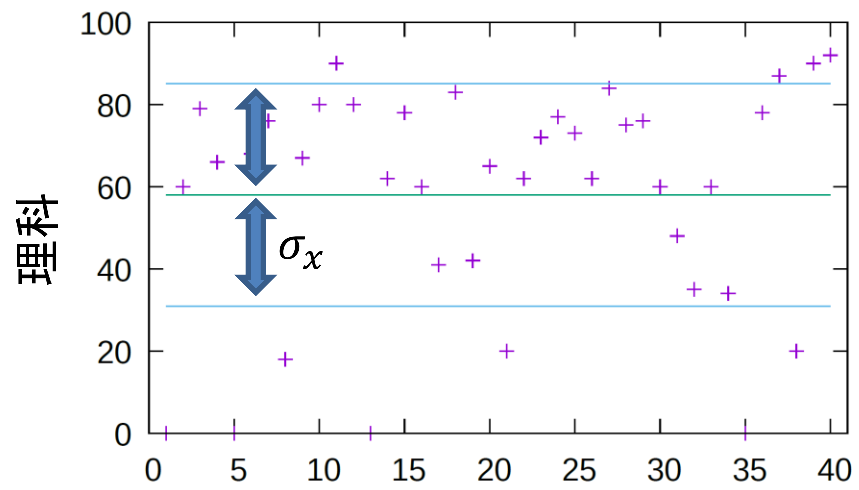
- 分散 (variance)

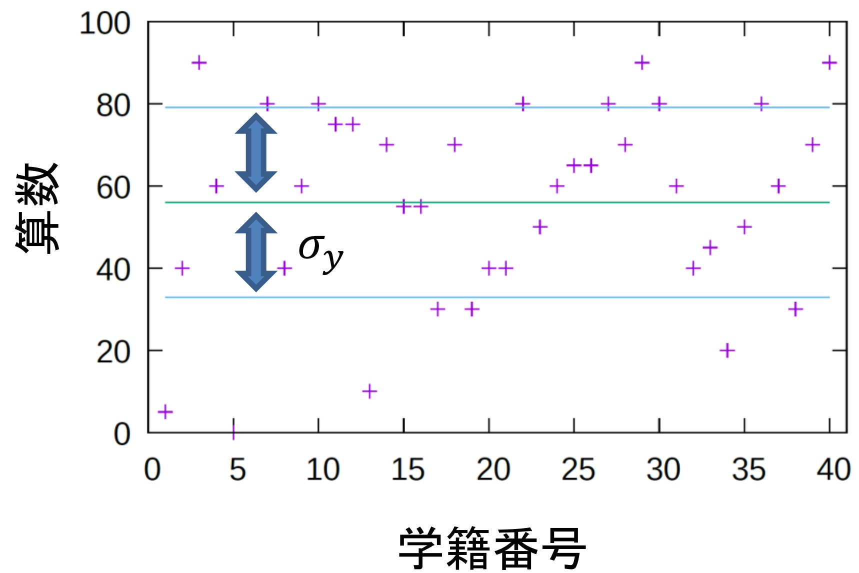
$$\sigma_x^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(x_i - \bar{x})^2$$
$$= \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} {x_i}^2 - \bar{x}^2$$

(Σ がどこまでを含むのか注意)

- 標準偏差 (standard deviation)

$$\sigma_x = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(x_i - \bar{x})^2}$$



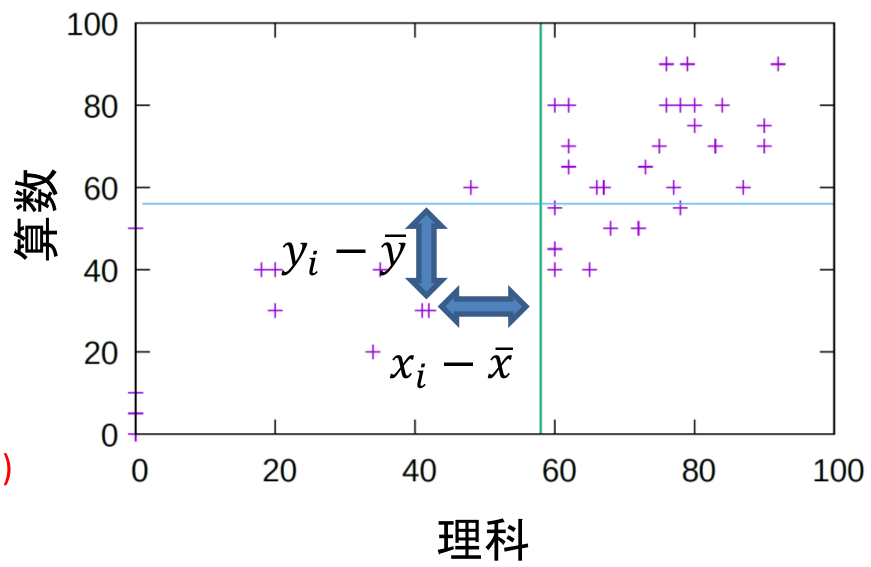


復習 : 共分散, 相関係数

- 共分散 (covariance)

$$C_{xy} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})$$
$$= \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i y_i - \bar{x}\bar{y}$$

(Σ がどこまでを含むのか注意)



- 相関係数 (correlation coefficient)

$$r = \frac{C_{xy}}{\sigma_x \sigma_y}$$

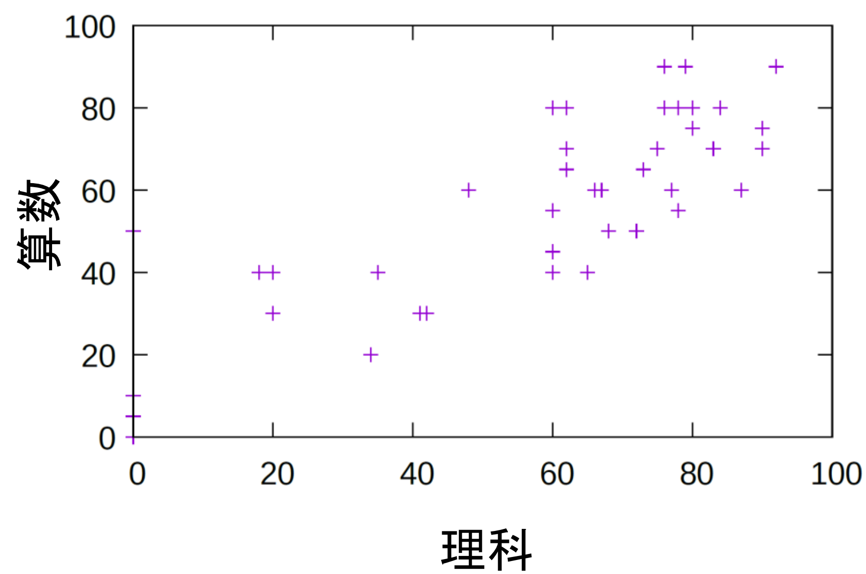
最小二乗法
概要 (1)

- ここまでに見てきた理科と算数の点数の組を考える.

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

- このとき, 理科と算数の点数の関係を, 下の関数で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.

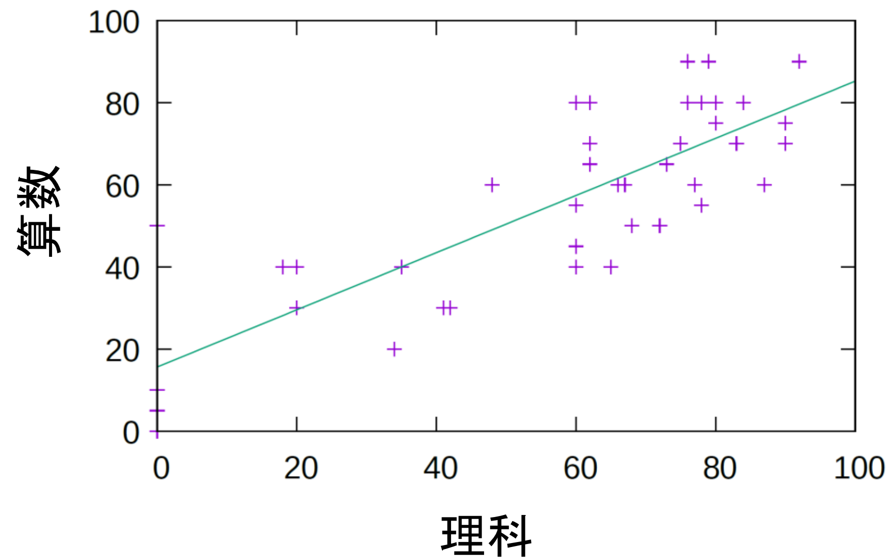
$$E = \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - f(x_i)\right)^2$$

- 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.

$$y = ax + b$$



最小二乗法
一次関数 (2)

- 二乗誤差は下のようになる.

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

- 一次関数の係数は, 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 (3)

- これは, 下のような, a, b の連立方程式となる.

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

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

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

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

最小二乗法 一次関数 (4)

- この連立一次方程式より, a, b は下のように求められる.

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

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

最小二乗法
一次関数 (5)

- 平均, 分散, 共分散を用いると, 下のように整理できる.

平均

$$\bar{x} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i$$

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

分散

$$\sigma_x^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(x_i - \bar{x})^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} {x_i}^2 - \bar{x}^2$$

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

共分散

$$C_{xy} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})$$
$$= \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i y_i - \bar{x}\bar{y}$$

(Σ がどこまでを含むのか注意)

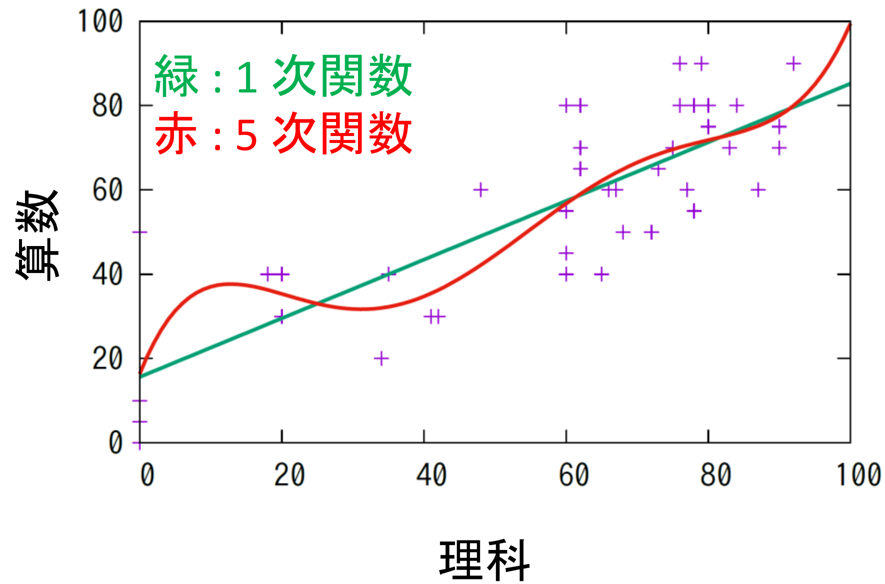
$$a = \frac{C_{xy}}{\sigma_x^2} \qquad b = \bar{y} - a\bar{x}$$

最小二乗法
補足 1

- 最小二乗法は,「回帰」(regression) で用いられる代表的な方法.
  - ここまでに説明した一次関数の決定は,「単回帰」とも呼ばれる.
  - なお, 独立変数が複数ある場合は「重回帰」とも呼ばれる.

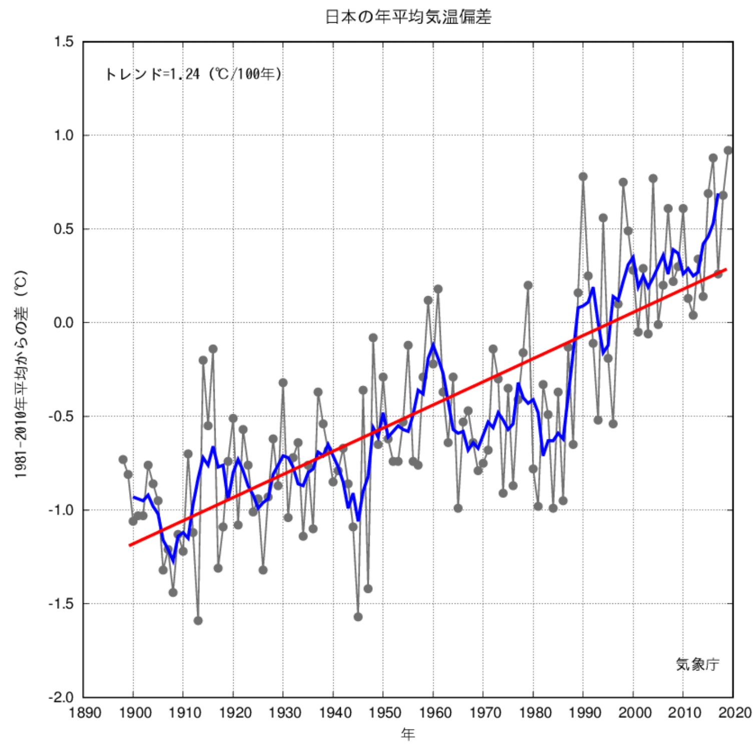
最小二乗法
補足 2

- 用いる関数は, 容易に多項式に拡張できる.
  - 高次の多項式を用いれば, 与えたデータの分布により近くなる.
  - しかし, 安易に高次の多項式を使えばよいわけではない.
    - 「オーバーフィッティング(over fitting)」「過学習」
  - 扱う現象の特性と, それを実現する理屈に基づいて適切な関数を用いることが必要.



移動平均

- 様々な時間･空間変動の中には, 生データのままでは「ギザギザ」していて変動が見にくいこともあるだろう（右図黒線）.
- 「ギザギザ」を除き, 長い時間･空間変動を見やすくするための方法が移動平均（右図青線）である.



http://www.data.jma.go.jp/cpdinfo/temp/an_jpn.html
2020/01/07 にダウンロードしました.

青線は 5 年間の移動平均の結果

移動平均

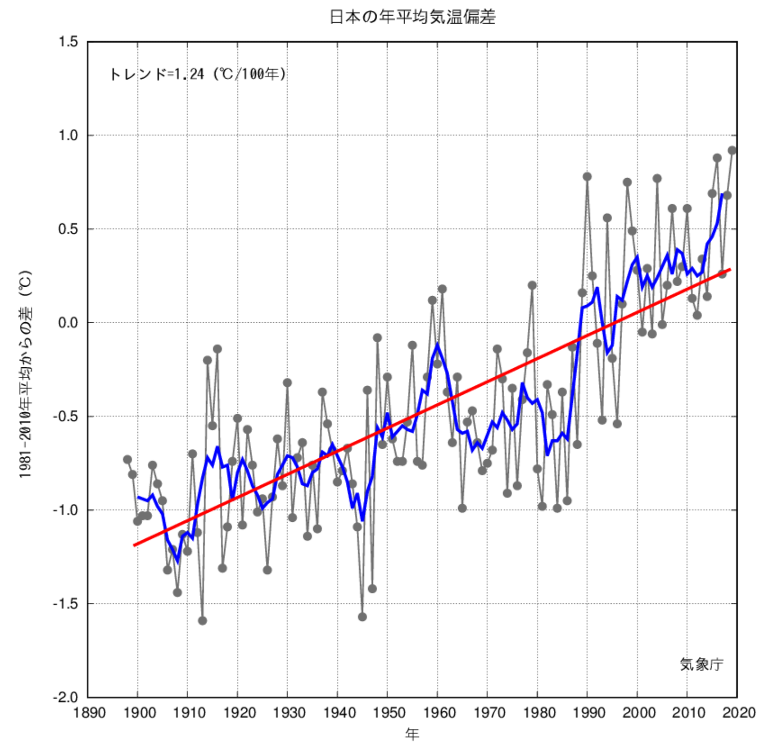
- 下のようなデータがあるとする.

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

- 区間ごとに平均値を求める.

$$(\bar{x}_1, \bar{y}_1), (\bar{x}_2, \bar{y}_2), \dots, (\bar{x}_{N-n+1}, \bar{y}_{N-n+1})$$

$$\bar{x}_j = \frac{1}{n} \sum_{i=j}^{j+n-1} x_i \qquad \bar{y}_j = \frac{1}{n} \sum_{i=j}^{j+n-1} y_i$$

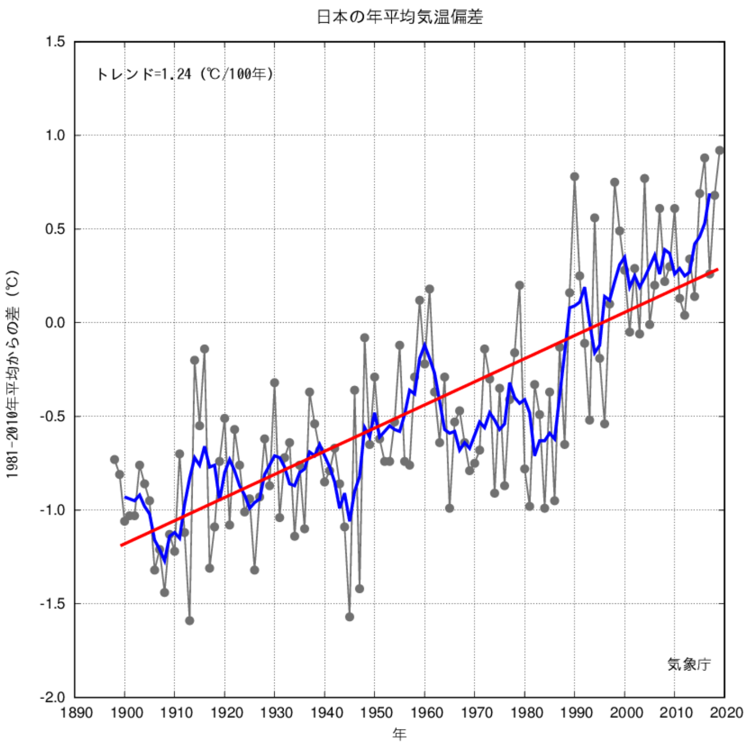


http://www.data.jma.go.jp/cpdinfo/temp/an_jpn.html
2020/01/07 にダウンロードしました.

青線は 5 年間の移動平均の結果

移動平均：補足

- 移動平均により，短い時間・空間変動が取り除かれるが，どの程度短い時間・空間変動が取り除かれているのかはよくわからない．
- 取り除かれる周期を明確にするにはフーリエ変換が必要である．
- しかしながら，移動平均は実用上便利なので，良く使われている．



http://www.data.jma.go.jp/cpdinfo/temp/an_jpn.html
2020/01/07 にダウンロードしました．

青線は 5 年間の移動平均の結果

実習へ

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