最小二乗法

m 個の測定点の組 $(x_i, y_i : i=1,\cdots,m)$ を関数 $f(x)$ で近似する。この近似関数 $f(x_i)$ と x_i に対応する測定値 y_i との差は残差 r_i と呼ばれる。

$$r_i = f(x_i) - y_i \quad i=1,\cdots,m$$

残差の平方和は次のようになる。

$$Q = \sum_{i=1}^{m} r_i^2 = \sum_{i=1}^{m}\left[f(x_i) - y_i\right]^2$$

最小二乗法ではこの Q を最小になるようパラメータを決める。ここでは近似の関数を n 次多項式としよう。

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 \cdots + a_j x^j + \cdots + a_n x^n$$

決めるべきパラメータは $a_0, a_1, a_2, \cdots, a_j, \cdots, a_n$ である。Q はこれら全てのパラメータの偏微分係数が同時に 0 になるとき最小値をとる。

$$\frac{\partial Q}{\partial a_j} = \frac{\partial \sum_{i=1}^{m}\left[f(x_i) - y_i\right]^2}{\partial a_j} = 2\sum_{i=1}^{m}\left[f(x_i) - y_i\right]\frac{\partial f(x_i)}{\partial a_j}$$

$$= 2\sum_{i=1}^{m}\left[f(x_i) - y_i\right]x_i^j = 0 \qquad j = 0,\cdots,n$$

これを正規方程式と言いこの方程式の解が残差を最小にするパラメータの組となる。式を次のように整理して

$$\sum_{i=1}^{m} x_i^j f(x_i) = \sum_{i=1}^{m} x_i^j y_i$$

$j = 0,\cdots,n$ で展開すると以下の正規方程式を得る。

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} x_i^0 & \sum_{i=1}^{m} x_i^0 x_i^1 & \cdots & \sum_{i=1}^{m} x_i^0 x_i^n \\ \sum_{i=1}^{m} x_i^1 & \sum_{i=1}^{m} x_i^1 x_i^1 & \cdots & \sum_{i=1}^{m} x_i^1 x_i^n \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \sum_{i=1}^{m} x_i^n & \sum_{i=1}^{m} x_i^n x_i^1 & \cdots & \sum_{i=1}^{m} x_i^n x_i^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \cdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} x_i^0 y_i \\ \sum_{i=1}^{m} x_i^1 y_i \\ \cdots \\ \sum_{i=1}^{m} x_i^n y_i \end{bmatrix}$$

まとめると

$$\begin{bmatrix} m & \sum_{i=1}^{m} x_i & \cdots & \sum_{i=1}^{m} x_i^n \\ \sum_{i=1}^{m} x_i & \sum_{i=1}^{m} x_i^2 & \cdots & \sum_{i=1}^{m} x_i^{n+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \sum_{i=1}^{m} x_i^n & \sum_{i=1}^{m} x_i^{n+1} & \cdots & \sum_{i=1}^{m} x_i^{2n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \cdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} y_i \\ \sum_{i=1}^{m} x_i y_i \\ \cdots \\ \sum_{i=1}^{m} x_i^n y_i \end{bmatrix}$$

例題　金属ナトリウムの光電効果で、入射光の波長の関数として、放出電子の運動エネルギーを測定した結果は次のようである。データをプロットして直線を得、その勾配と切片から $\boldsymbol{h}$ とφを求めよ。

λ／nm	**100**	**200**	**300**	**400**	**500**
KE / eV	**10.1**	**3.94**	**1.88**	**0.842**	**0.222**

解答例
最小二乗法を使って直線の式を求める。
与えられた数値の波長は振動数に変換する。$\nu = c / \lambda$
$n = 1$ であるので $x_i\, y_i$ と x_i^2 を計算し、これらを以下の表にまとめた。
右端の欄に和の値を示す

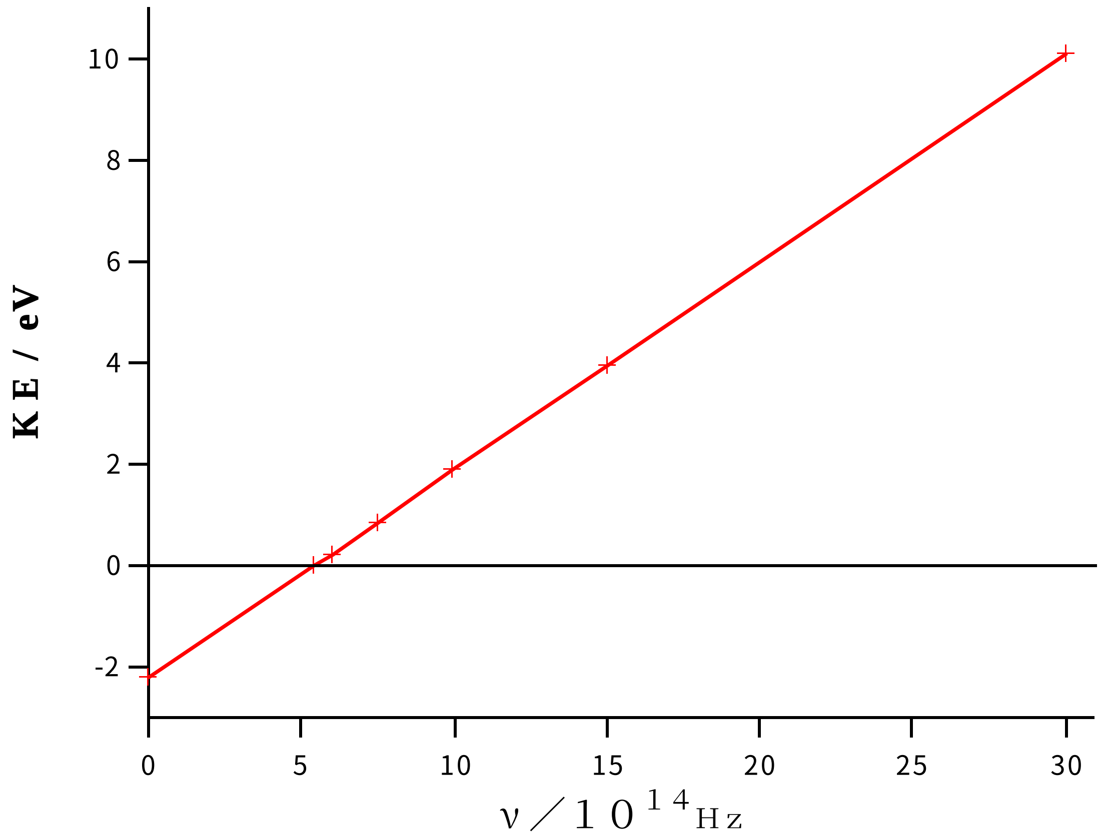
	100	200	300	400	500	λ／nm
y_i	10.1	3.94	1.88	0.842	0.222	16.98　KE / eV
x_i	30.0	14.99	9.99	7.49	6.00	68.47　ν／10^{14} Hz
$x_i\, y_i$	303	59.06	18.78	6.31	1.33	388.5
$x_i^1\ x_i^1$	900.0	224.7	99.8	56.1	36.0	1317

正規方程式は次のようになる。

$$\begin{bmatrix} 5 & 68.47 \\ 68.47 & 1317 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 16.98 \\ 388.5 \end{bmatrix}$$

これより $a_0 = -2.234$， $a_1 = 0.4112$ を得る。
$KE = h\nu - \phi = 0.411 \cdot \nu - 2.23$
$\phi = 2.23\ \mathbf{eV} = 2.23 \times 1.602 \cdot 10^{-19} = 3.57 \cdot 10^{-19}\ \mathbf{J}$
$\boldsymbol{h} = \mathbf{0.411 \cdot 10^{-14}\ eV\,s = 0.411 \cdot 10^{-14} \times 1.602 \cdot 10^{-19} = 6.58 \cdot 10^{-34}\ Js}$
しきい振動数は
$\nu_0 = \phi / h = 2.234 / 0.4112 \cdot 10^{-14} = 5.43 \cdot 10^{14}$　**Hz**

プロットを次に示す。



K E / eV
10
8
6
4
2
0
-2
0
5
10
15
20
25
30
ν / 10¹⁴ Hz