

目 次

はしがき

第1章 はじめに

§ 1.1 簡単な実験例とその整理	1
§ 1.2 データ解析の実状	6
§ 1.3 最小二乗法標準プログラムシステム SALS の作成	7
§ 1.4 本書の構成	9

第2章 測定とデータ解析

§ 2.1 測定と誤差	11
ばらつきと偏り/“誤差”と“精度”	
§ 2.2 母集団と確率分布	13
母集団と標本/確率分布の例/確率変数とその関数	
§ 2.3 尤度と最尤推定法	18
§ 2.4 データ解析法の諸分類	20
§ 2.5 データ解析とあてはめの過程	26

第3章 最小二乗法の基礎

§ 3.1 データ解析の問題の設定	29
§ 3.2 最小二乗法の前提と原理	30
§ 3.3 線形モデルでの最適パラメータの決定	33
添字による表示/行列による表示	
§ 3.4 非線形モデルの線形近似反復解法	38
§ 3.5 標準偏差 $\hat{\sigma}$ と χ^2 検定	40
§ 3.6 パラメータ推定値 \hat{x} の誤差	44
§ 3.7 モデルによる計算値 $f(\hat{x})$ の推定誤差	49

§ 3.8	最小二乗法の前提の再検討	51
第4章 線形最小二乗法		
§ 4.1	数値計算と誤差	55
§ 4.2	ランクと条件数 ノルム/特異値/条件数/正規方程式と条件数	56
§ 4.3	一般逆行列 最小二乗解を与える一般逆行列/Moore-Penrose の一般逆行列	63
§ 4.4	修正 Gram-Schmidt 法 古典的 Gram-Schmidt 法/修正 Gram-Schmidt 法/解の計算/解の 反復改良/ピボット選択とランク落ち/誤差行列の計算/条件数の推 定	65
§ 4.5	Householder 法 Householder 変換/Householder 変換を用いた QR 分解/ピボット選 択とランク落ち/解の計算	72
§ 4.6	特異値分解法 特異値分解と最小二乗法/二重対角化/QR 法による対角化/行列の 分割/実際のアルゴリズム	76
§ 4.7	Cholesky 法 正規方程式を用いる解法/Cholesky 分解/解の計算/ピボット選択 とランク落ち	81
§ 4.8	固有値分解法 固有値分解と正規方程式/Householder 変換による三重対角化/原点 移動を含む QR 法	83
§ 4.9	SALS における線形解法の構成 線形最小二乗法のまとめ/正規方程式を立てない線形解法の管理/正 規方程式の解法の管理	86
§ 4.10	SALS における線形解法の性能	91
第5章 非線形最小二乗法		
§ 5.1	非線形最小二乗法のアルゴリズム 一般的最小化/Newton 法系の方法/Gauss-Newton 法系の方法	95

§ 5.2	Gauss-Newton 法 縮小因子による安定化/収束判定	98
§ 5.3	修正 Marquardt 法 Marquardt 法/ λ パラメータの調節法/対角付加項のとり方/収束判 定	99
§ 5.4	ハイブリッド法 ハイブリッド法の原理/線形化模型の最急降下解/修正ベクトルとス テップ幅/ヤコビアン行列の逐次修正/修正ベクトルの独立性	110
§ 5.5	各解法の比較 数値計算例/解法の選び方	120
第6章 測定値の扱い方		
§ 6.1	重みの選び方 重みのとり方の一例/別種の測定データの総合的解析/重みと残差	125
§ 6.2	変換したデータを扱う方法	128
§ 6.3	装置関数と時定数	129
§ 6.4	“横軸”にも誤差がある場合の扱い方	130
第7章 モデルの選択		
§ 7.1	モデルの選び方と近似	133
§ 7.2	パラメータの線形変換 パラメータの線形変換の一般式/パラメータの選び方/変換例:パラ メータの差	134
§ 7.3	直交化パラメータ \mathbf{x}' によるあてはめ ヤコビアン列ベクトル \mathbf{a}_j の考え方/直交化パラメータ \mathbf{x}' への変換	137
§ 7.4	高次項を導入したときの影響 低次項パラメータの推定値がシフトする/低次項パラメータの標準偏 差は増大する/高次項の直交成分	139
§ 7.5	高次項を安定に導入する方法 情報の追加と問題の安定化/緩い束縛条件の扱い方/等式束縛条件の 扱い方	144

§ 7.6	高次項パラメータを仮定したときの影響	147
	低次項パラメータの推定値とそのみかけ上の誤差／仮定の不確かさを 含めた誤差の推定法	
§ 7.7	モデルの選択と AIC	150
	モデル選択／赤池の情報量規準—AIC／誤差が既知の場合／誤差が未 知の場合／SALS における AIC	
第 8 章 あてはめ結果の診断とロバスト推定法		
§ 8.1	残差のプロットと診断	159
	残差プロットの重要性／残差のスケーリング／残差のヒストグラム／ 横座標をとり入れた残差のグラフ表示／残差が大きい測定値の処理／ 残差の正規確率プロット	
§ 8.2	ロバスト推定法	163
	ロバスト推定法の考え方／M推定法の導入／M推定法の実際／ロバス ト推定法の効果／SALS におけるロバスト推定法／ロバスト推定法の 使い方	
第 9 章 最小二乗法標準プログラムシステム SALS		
§ 9.1	SALS システムの基本仕様	177
§ 9.2	SALS システムの構成	178
§ 9.3	SALS システムの入力データと制御	182
§ 9.4	SALS システムの処理の概要	186
§ 9.5	SALS システムの出力	188
§ 9.6	SALS システムの利用について	195
参考文献		197
索引		202