本日の演習内容

最小二乗法　その２

一次関数 $y = ax + b$ に関して、最小自乗法は解析的に解くことができる。

$$傾き：a = \frac{\sum_i^n x_i y_i - n\bar{x}\cdot\bar{y}}{\sum_i^n x_i^2 - n\bar{x}^2}$$

$$切片：b = \frac{\bar{y}\sum_i^n x_i^2 - \bar{x}\sum_i^n x_i y_i}{\sum_i^n x_i^2 - n\bar{x}^2}$$

$$ただし、\bar{y} = \frac{1}{n}\sum_i^n y_i、\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_i^n x_i$$

課題 1

サーミスタの温度 t (°C) と抵抗 R (kΩ) の関係は次のように表される。

$R = R_0 \exp (A / (t + 273.15))$

下のデータを用いて、上の関係を最適化する R_0 と B の値を求めよ。

t_i	0	10	20	40	50	60	70	80	90	100
R_i	110.0	70.0	46.0	21.5	15.0	11.0	8.1	6.0	4.6	3.5

（考え方）

(1) 上式の両辺の対数をとり、$\ln R_i = A / (t_i + 273.15) + \ln R_0$ とする。

(2) $y_i = \ln R_i$、$x_i = 1 / (t_i + 273.15)$ とおくと、$y_i = A \times x_i + \ln R_0$ となる。

(3) ここで、傾き a は A、切片 b は $\ln R_0$ である。

(4) 散布図に回帰直線を挿入したものを作製する。

(5) R_0 の値を求める。（切片 b から「=EXP(b)」を使う）

(6) こういう操作をいちいち行わなくても、**Excel は近似曲線を自動で求めてくれる**ので、その機能を使ってみる。
   a) 絶対温度の逆数に対して $\ln R_i$ をプロットする。
   b) データ点を選択し、右クリックして「近似曲線の追加」を選択。
   c) 線形近似を選択し、グラフに数式を表示させる。詳細は授業で説明する。

(7) 同様に、絶対温度の逆数に対して R_i をプロットし、指数関数の近似曲線を製作する。

課題 2

番号をふりながら、1 から順番に番号をふりながら、素数を小さい方から順番に 10 個ならべ、多項式で、１次、２次、３次の近似曲線を求めてみる。

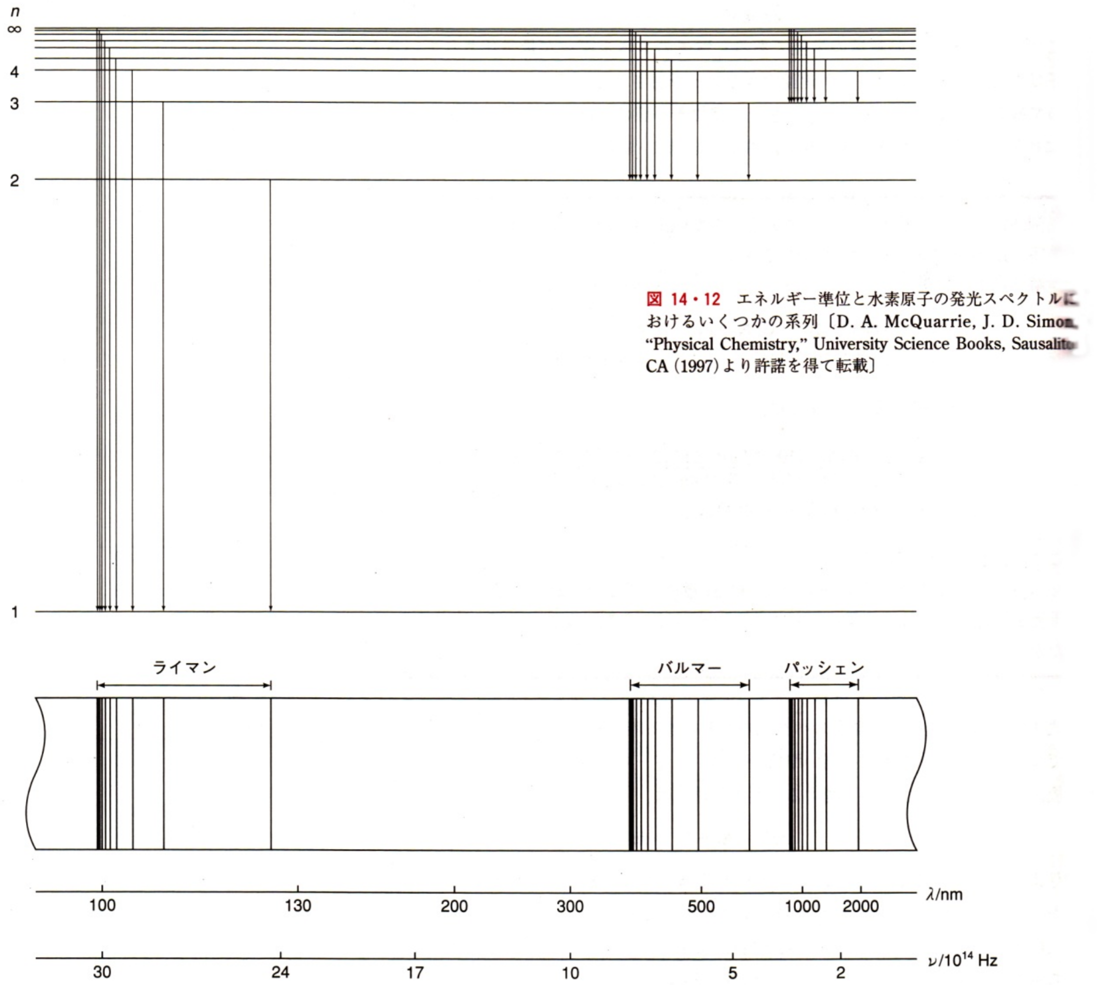

図 14・12　エネルギー準位と水素原子の発光スペクトルにおけるいくつかの系列〔D. A. McQuarrie, J. D. Simon, "Physical Chemistry," University Science Books, Sausalito, CA (1997) より許諾を得て転載〕

課題 3

気体水素に放電すると、水素分子 H_2 が解離して、エネルギー的に励起された水素原子 H ができ、離散的な波数の光を放出する。これがいわゆる水素原子の発光スペクトルであり、スウェーデンの分光学者リュードベリは、これらスペクトルの線列に以下の法則があることを 1890 年に発見した。

$$\bar{\nu} = R_H\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$$

ただし、$n_1 = 1, 2, 3, \cdots$、$n_2 = n_1+1, n_1+2, n_1+3, \cdots$ であり、R_{H} はリュードベリ定数である。

水素原子の発光スペクトルには、波数が 82259、97492、102824、105292、106632、107440 $\mathrm{cm^{-1}}$ のところに輝線がある。$n_1 = 1$ としてリュードベリ定数の値を導出せよ。

- 完成したら、ファイルをメールに添付して提出すること。

送り先：ynagasa あっと fc.ritsumei.ac.jp

- メールのタイトルは"基礎演習 2 レポート：氏名と学生証番号"とすること。
- 提出ファイルの最初のページの右上には必ず氏名と学生証番号を記入すること。
- ファイル名は "氏名+171025" とする。（例：立命太郎 171025）
（「.xlsx」等の拡張子は自動で付くので、自分で書き込む必要はない）
- ファイル名の「氏名」以外は必ず半角。
- 最終締め切り：2017 年 10 月 31 日（火曜）。
- 日常点評価の提出課題は**定期試験と同等の意味があるので真剣に取り組むこと**。