附錄E 最小方差擬合法(The least square fitting method)

(1)簡介：

此方法主要使用於尋找實驗數據所符合的曲線，此曲線可以明顯呈現實驗數據的變化趨勢，有助於驗證一些物理變化的規律或特性。

(2)方法：

首先假設一條曲線(以 y=f(x)之多項式表示)，使所有數據到此曲線的垂直距離最小。若”x_i, y_i”表示數據點，其中 x_i 可視為自變數，而 y_i 可視為函數值或為因變數，則數據點到曲線的垂直距離可寫成 $|y-y_i| = |f(x_i)-y_i|$，而最小擬差法就是使 $\chi^2 = \sum [f(x_i)-y_i]^2$ 的值為極小，藉此求出適合的曲線 f(x)。根據統計理論，χ^2 的定義可寫成：

$$\chi^2 = \sum_i \left[\frac{f(x_i)-y_i}{\sigma_i} \right]^2 \qquad (1)$$

式中 σ_i 為實驗數據 y_i 的標準差(即 $\sigma_i = y_i - \bar{y}$， $\bar{y} \equiv y_i$ 的平均值)。為簡化演算，我們以一次式(即直線)的最小方差擬合法為例來說明。

假設 n 個實驗數據 $(x_i, y_i \pm \sigma_i)$，若最佳描述直線為 f(x)=ax+b，則由上述定義式(1)可知：

$$\chi^2 = \sum_i^n \left[\frac{(ax_i+b)-y_i}{\sigma_i} \right]^2 \qquad (2)$$

如果欲使 χ^2 最小，則 a 及 b 必須滿足的條件為：

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a} = 0 \Rightarrow a\sum_i^n \frac{x_i^2}{\sigma_1^2}\sum_i + b\sum_i^n \frac{x_i}{\sigma_1^2} - \sum_i^n \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2} = 0 \qquad (3)$$

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial b} = 0 \Rightarrow a\sum_i^n \frac{x_i^2}{\sigma_1^2} + b\sum_i^n \frac{1}{\sigma_1^2} - \sum_i^n \frac{y_i}{\sigma_i^2} = 0 \qquad (4)$$

然後，由(3)及(4)即可求得：

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

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

其中 $$\Delta \equiv \sum_{i}^{n} \frac{1}{\sigma_i^2} \cdot \sum_{i}^{n} \frac{x_i^2}{\sigma_i^2} - \left(\sum_{i}^{n} \frac{x_i}{\sigma_i^2} \right)^2$$

而 a 及 b 分別代表直線的斜率與截距，於是，根據這兩個參數便能作出一直線於數據圖上，並且此直線即為最接近各數據點的曲線。