自然科学の歩き方

第4回目

モデル

- 「自然を理解する」と言っても，神ならぬ身である人間には全てを完全に理解することは（おそらく）不可能
- 余計な複雑さを削ぎ落とした「モデル」によって理解
- 現象を大雑把に描写するもの
  - どれくらい大雑把でいいかというのは，測定値の誤差の議論に基づいて決まる
  - 実験誤差（統計誤差と系統誤差）と理論誤差（ある意味では系統誤差の一部）

誤差の議論

- ⭐ データには誤差がある
- ⭐ モデルによる予測にも（場合によって）誤差が入る
- ⭐ 本当は誤差の評価をきちんとやった上でデータ分析
- ⭐ 誤差を正確に評価するのは重要

モデルとモデルパラメータ

数学的に表現されたモデルはモデルパラメータを含む

- モデルパラメータとは何か？
  - モデルに登場するパラメータのこと
  - 例えば，電流Iが電圧Vと比例するというモデルでは

$$I = \boxed{a}V$$

- パラメータが少ないモデルほど予言能力は高くなる

最小二乗法のアイデア

あるモデル$y=f(x)$が与えられた時，

測定データの組$(x_1,y_1),(x_2,y_2)\cdots$を用いて，

$$\chi^2 = \sum_i \frac{(y_i - f(x_i))^2}{\boxed{\sigma_i^2}}$$

測定や計算に伴う誤差[2]

が最小になるようにモデルパラメータを決めればよい

簡単な場合として$\sigma_1 = \sigma_2 = \cdots = \sigma_N$ を考えると

$$\sigma^2\chi^2 = \sum_i (y_i - f(x_i))^2$$

二乗誤差の和

が最小のときが，測定値の組を再現できる確率が最大

再現性の評価

- χ^2(二乗誤差の和)が小さいほど，データの再現性は良い。
- モデルを複雑にすれば，一般に再現性は向上する
  - モデルの予言能力はなくなる
  - 新たな測定点が追加された場合に，最良のモデルパラメータの値が大きく変動する可能性
  - モデルが正しい＆測定の精度がよければ，データ点が増えてもパラメータの値はそんなに変わらないはず

前回やったこと

電流Iと電圧Vの間にI=aVという関係があるものと推定し，今回の推定値を最もよく表すaの値を探すことを考える。

V [V]	1.50	3.00	4.50	6.00	7.50	9.00
I [A]	5.64×10^{-2}	1.12×10^{-1}	1.86×10^{-1}	2.22×10^{-1}	3.25×10^{-1}	3.32×10^{-1}

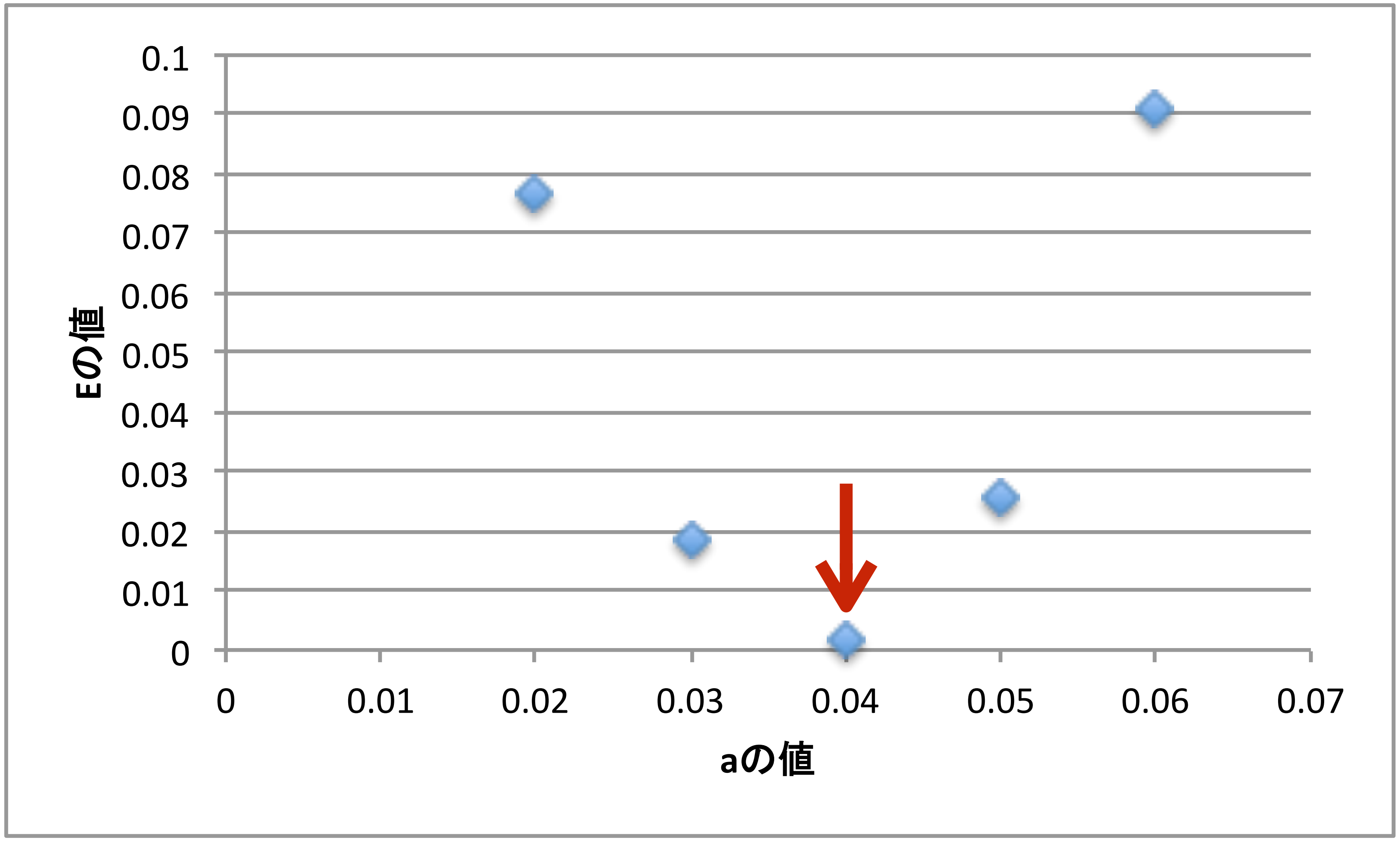
1. aの値を0.02から0.01刻みで0.06まで変化させる。それぞれのaの値について，二乗誤差Eを計算し，表に書き込め。

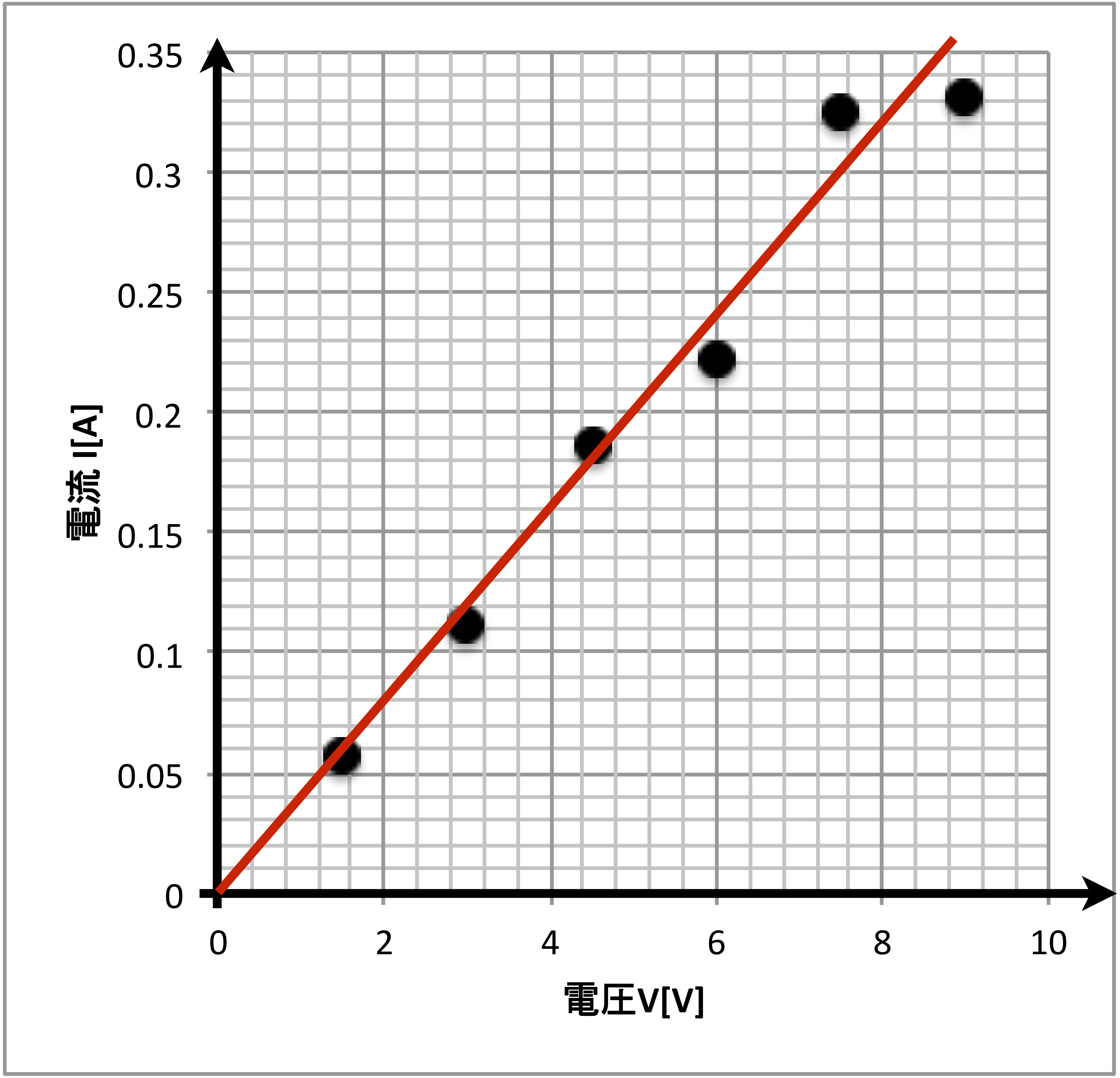
aの値	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06
Eの値					

2. 今回調べたaの値の中で，最も良く測定データを表すものは何か。そのaを用いたI=aVの直線を，グラフ中に実線で書き込め。

結果

aの値	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06
Eの値	0.0767	0.0188	0.00185	0.0258	0.0907




0.35
0.3
0.25
0.2
0.15
0.1
0.05
0
電流 I[A]
0
2
4
6
8
10
電圧V[V]

これからやること

- ⭐ もっと効率良く最良のモデルパラメータを発見できないか？
- ⭐ 微分を利用すると，最小二乗法を定式化できる
- ⭐ 別な表現：微分を利用すると楽ができる
- ⭐ そのための準備として，「微分の復習と微分の利用」が今日のテーマ

微分とは何か

- 変数xについての関数y=$f(x)$を考える。xが微小に変化した時，関数$f(x)$の値がどのように変化するか？

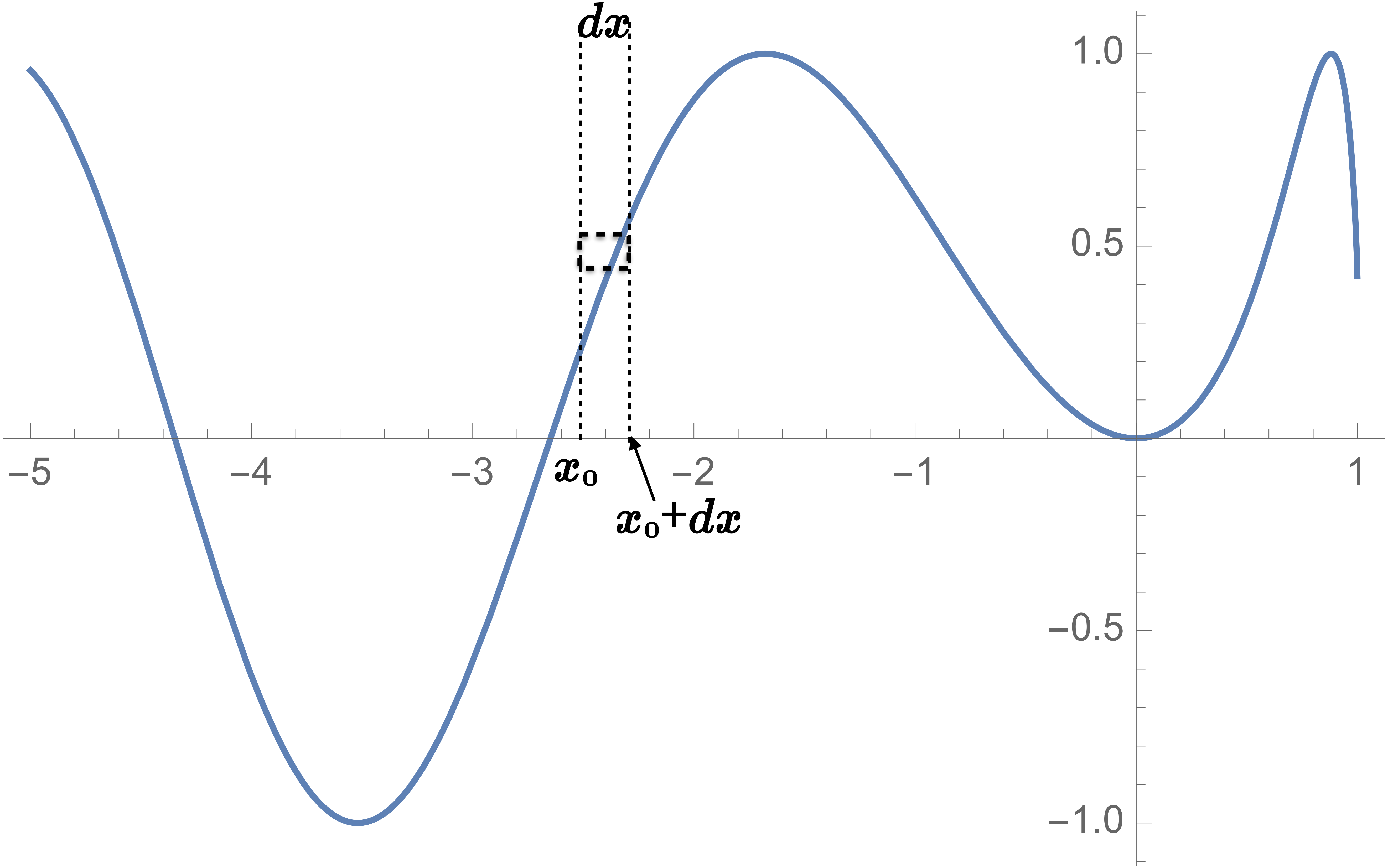
- 正しくはxやyの「微小変化分」dx, dyのことを微分という。

- xが$\boldsymbol{\Delta x}$だけ変化した時，

$$\Delta f = f(x + \Delta x) - f(x)$$

$\boldsymbol{\Delta x}$を無限に小さくしていくと，どうなるか？

十分小さくとった$\boldsymbol{\Delta x}$をdxと書く。



dx
1.0
0.5
−0.5
−1.0
−5
−4
−3
x₀
−2
−1
1
x₀+dx

直線で近似できる！

$$y = ax + b$$

ただし，x_0~x_0+dxの区間のみで成り立つ近似

この直線の傾きは？

$$\frac{df(x_0)}{dx} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}$$

$x=x_0$における微分係数という

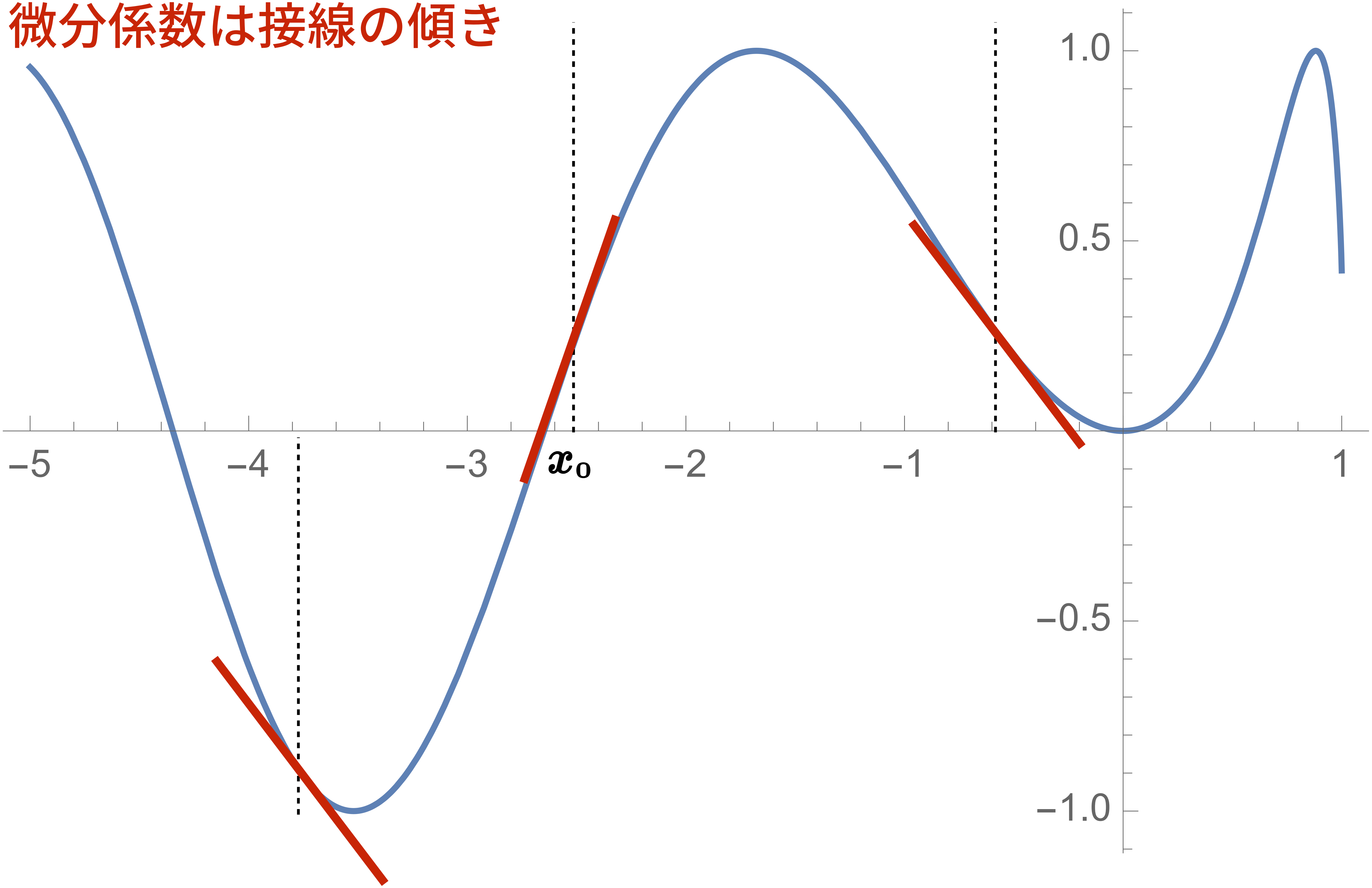
微分係数の泥臭い計算

$f(x)=x^2$

- $x_0=1$，$\Delta x=1$として$\Delta f/\Delta x$を計算せよ　$\dfrac{\Delta f}{\Delta x}=\dfrac{4-1}{1}=3$
- $x_0=1$，$\Delta x=0.5$として$\Delta f/\Delta x$を計算せよ　$\dfrac{\Delta f}{\Delta x}=\dfrac{2.25-1}{0.5}=2.5$
- $x_0=1$，$\Delta x=0.2$として$\Delta f/\Delta x$を計算せよ　$\dfrac{\Delta f}{\Delta x}=\dfrac{1.44-1}{0.2}=2.2$
- $x_0=1$，$\Delta x=0.1$として$\Delta f/\Delta x$を計算せよ　$\dfrac{\Delta f}{\Delta x}=\dfrac{1.21-1}{0.1}=2.1$
- $x_0=1$，$\Delta x=0.05$として$\Delta f/\Delta x$を計算せよ　$\dfrac{\Delta f}{\Delta x}=\dfrac{1.1025-1}{0.05}=2.05$
- $x_0=1$，$\Delta x=0.01$として$\Delta f/\Delta x$を計算せよ　$\dfrac{\Delta f}{\Delta x}=\dfrac{1.0201-1}{0.01}=2.01$

$$\frac{df(x)}{dx}=2x \quad \longleftrightarrow \quad \frac{\Delta f(1)}{\Delta x}\to 2$$

微分係数は接線の傾き



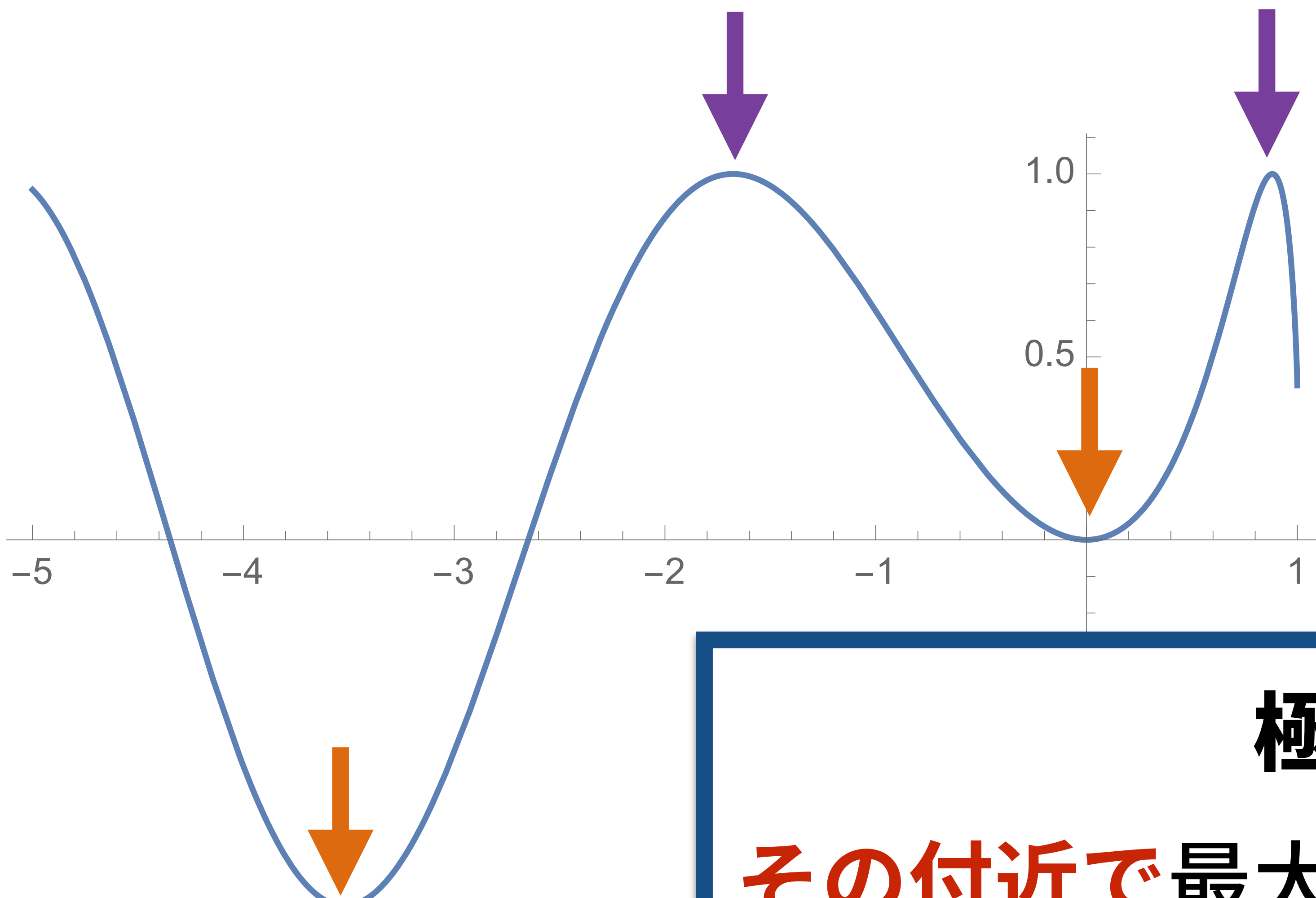
x_0を色々変えると，それに応じて微分係数の値も変化

$\dfrac{df(x)}{dx}$:導関数

微分の利用その1

微分係数＝グラフの（接線の）傾き

関数の極大，極小を求めるのに微分係数を利用できる

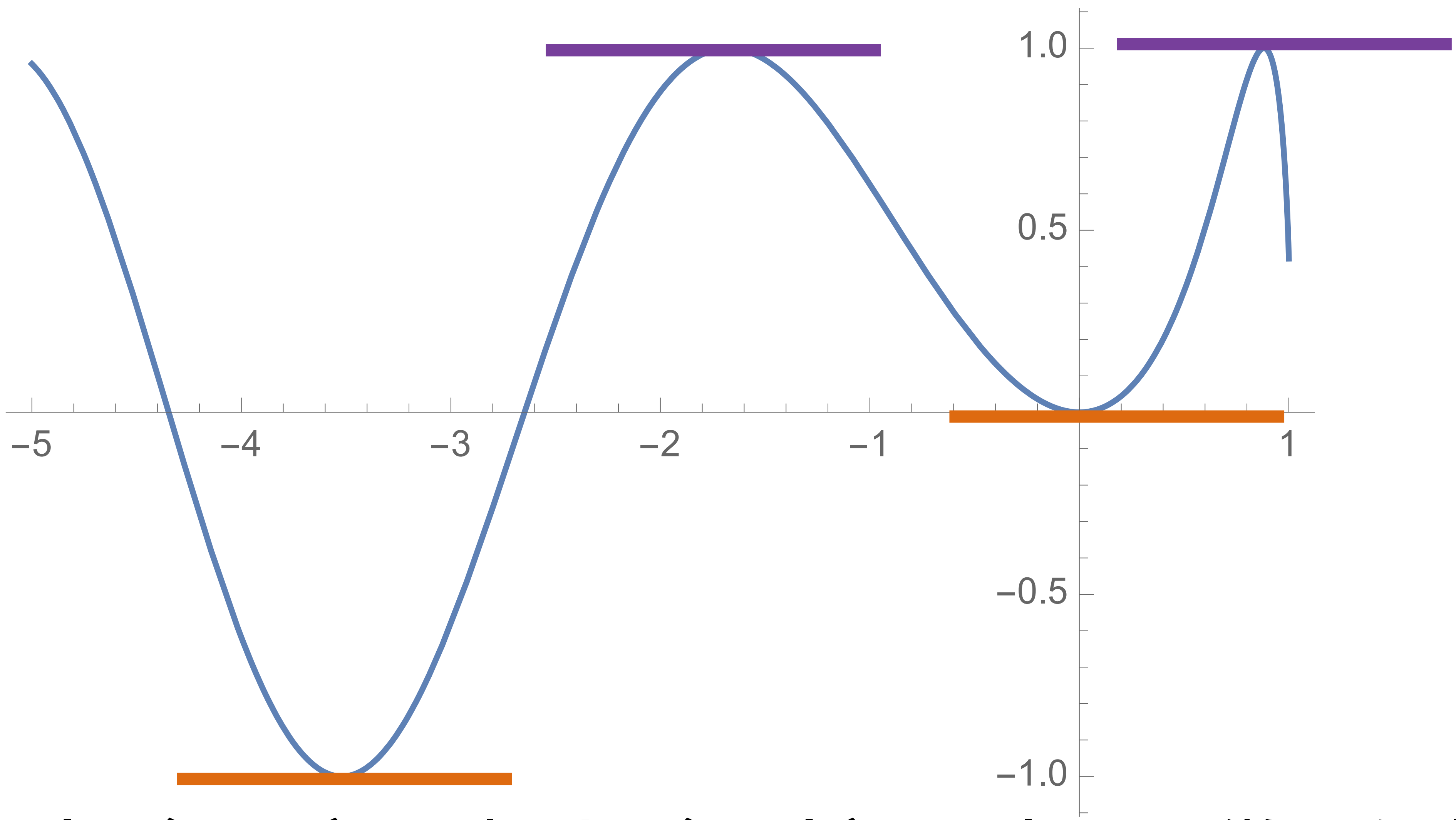


極大・極小

その付近で最大・最小の点

定義域内での最大・最小とは限らない

どうやって極大・極小を探すか



極大（山頂）・極小（谷底）の点では微分係数が0になる

⭐ 極大：接線の傾き(微分係数)が　正→ゼロ→負

⭐ 極小：接線の傾き(微分係数)が　負→ゼロ→正

二階微分との関係

- 微分係数の変化を表すのが二階微分
  - 微分係数が減少 $$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} < 0$$
  - 微分係数が増加 $$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} > 0$$
- 極大・極小の性質
  - 極大 $$\frac{df(x)}{dx} = 0$$ かつ $$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} < 0$$
  - 極小 $$\frac{df(x)}{dx} = 0$$ かつ $$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} > 0$$

やってみよう

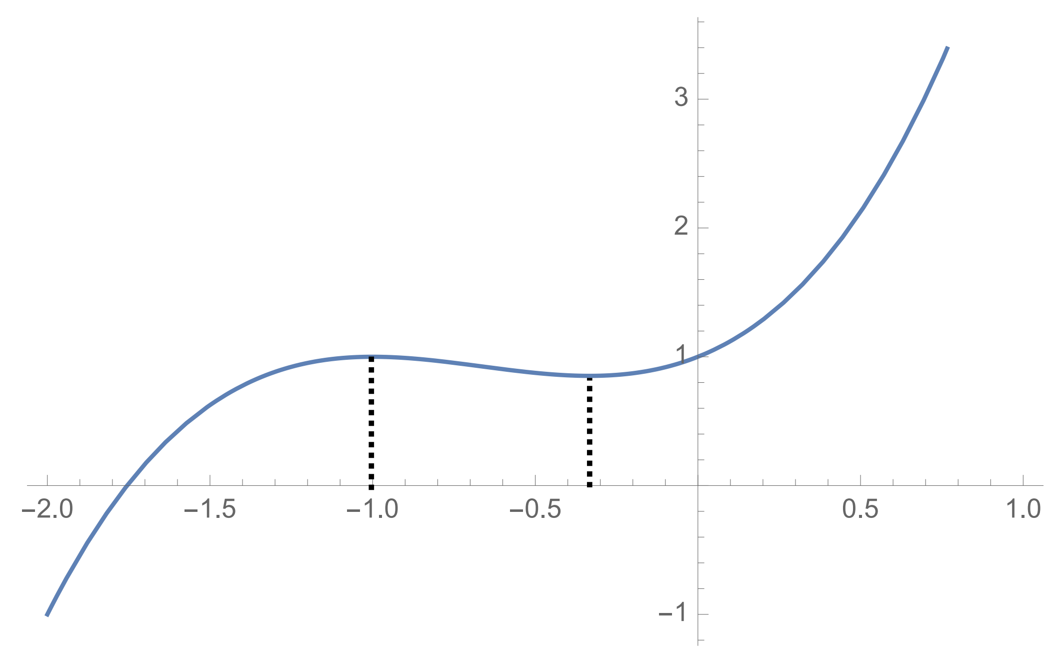
次の関数の極大・極小を求め，グラフの概形を描け。

$$f(x) = x^3 + 2x^2 + x + 1$$

$$\frac{df(x)}{dx} = 3x^2 + 4x + 1 = (3x+1)(x+1)$$

$$\frac{d^2f(x)}{dx^2} = 6x + 4$$

x		-1		$-\frac{1}{3}$	
$\frac{df(x)}{dx}$	+	0	-	0	+
$\frac{d^2f(x)}{dx^2}$		-2		2	
$f(x)$	↗	1	↘	$\frac{23}{27}$	↗



微分の利用　その2

- 微分の基本的な思想：
  微分可能な関数は局所的には直線で近似できる

- もう少し，こましな近似を考えたい

  - 高階の微分係数を利用することで，べき級数による近似が可能

  - テイラー展開，マクローリン展開

テイラーの定理

関数$f(x)$が開区間(x_0,x)でn階微分可能であるとき，次が成り立つ

$$\begin{aligned} f(x) =& f(x_0) + \frac{1}{1!}\frac{df(x_0)}{dx}(x-x_0) \\ &+ \cdots + \frac{1}{(n-1)!}\frac{d^{n-1}f(x_0)}{dx^{n-1}}(x-x_0)^{n-1} + R_n(x) \end{aligned}$$

$$R_n(x) = \frac{1}{n!}\frac{d^n f(c)}{dx^n}(x-x_0)^n$$ 剰余項という

cは開区間(x_0,x)内の数
R_nは，$f(x)$をn−1次までのベキ級数で近似したときの誤差を表すと思えばよい。

テイラー展開

$f(x)$が無限回微分可能であるとして，

nをどんどん大きくしていく

このとき，$\lim_{n\to\infty} R_n(x) = 0$ が成り立つならば

高次のベキを用いて展開すればするほど近似の精度が上がる

$|x - x_0| < R$ の全てのxについて

$$\lim_{n\to\infty} R_n(x) = 0$$

が成り立つ場合，このRを収束半径という。

$x_0 - R < x < x_0 + R$ に対しては，テイラー展開を利用したベキ級数による近似が使える。

テイラー展開

$x_0 - R < x < x_0 + R$ に対し，

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{d^k f(x_0)}{dx^k} \right) (x - x_0)^k$$

をテイラー展開という

例題

$f(x)=x^5$を$x=1$のまわりでテイラー展開してみよ。

例題

$f(x)=x^5$を$x=1$のまわりでテイラー展開してみよ。

$$\frac{df(x)}{dx}=5x^4 \qquad \frac{df(1)}{dx}=5$$

$$\frac{d^2f(x)}{dx^2}=20x^3 \qquad \frac{d^2f(1)}{dx^2}=20$$

$$\frac{d^3f(x)}{dx^3}=60x^2 \quad \longrightarrow \quad \frac{d^3f(1)}{dx^3}=60$$

$$\frac{d^4f(x)}{dx^4}=120x \qquad \frac{d^4f(1)}{dx^4}=120$$

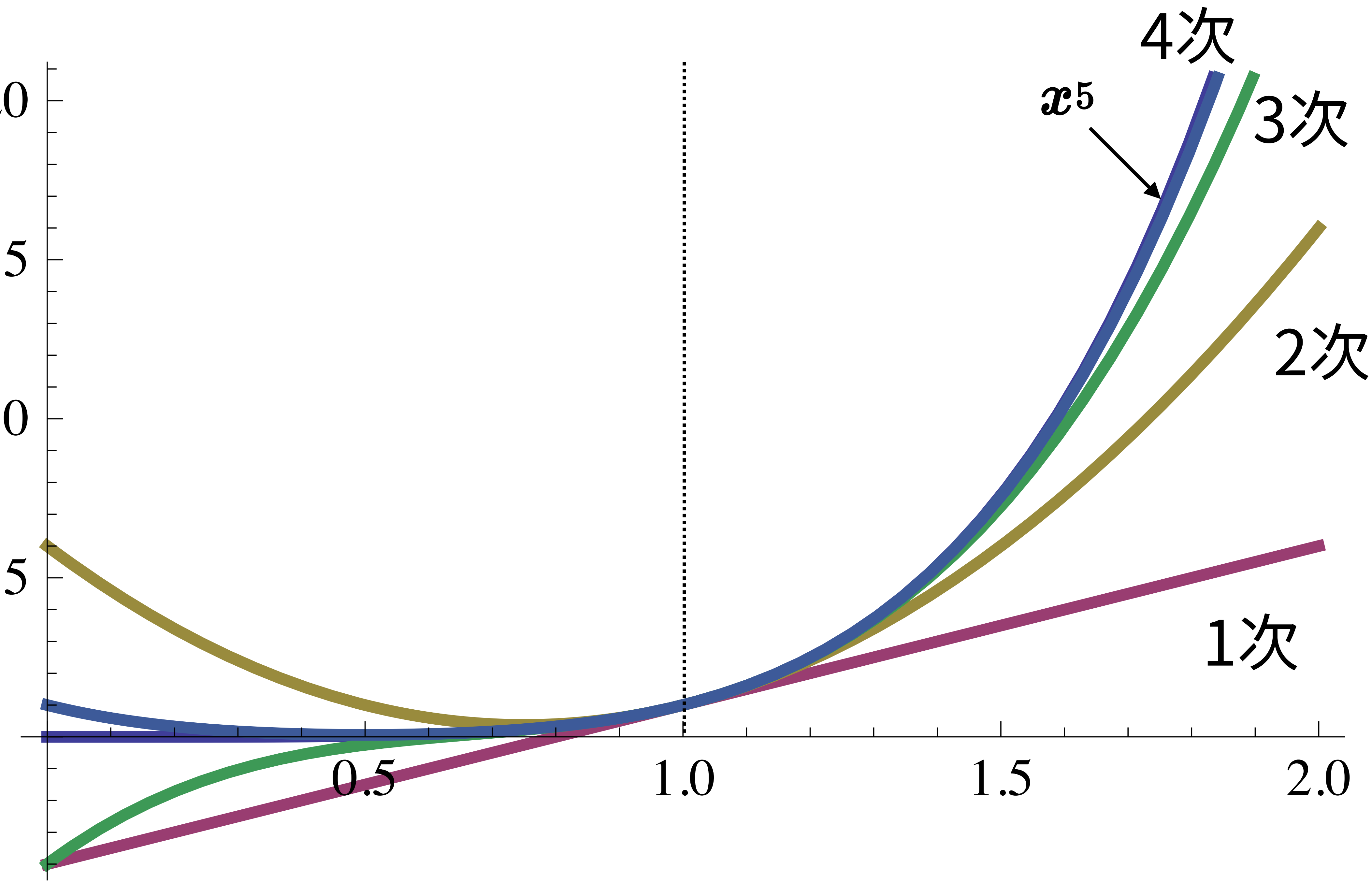
$$\frac{d^5f(x)}{dx^5}=120 \qquad \frac{d^5f(1)}{dx^5}=120$$

$$f(x)=1+5(x-1)+10(x-1)^2+10(x-1)^3+5(x-1)^4+(x-1)^5$$

当然ながら，この場合の収束半径は∞である

例題

$$f(x) = 1 + 5(x-1) + 10(x-1)^2 + 10(x-1)^3 + 5(x-1)^4 + (x-1)^5$$



テイラー展開の利用

次の値を**電卓を用いずに，**小数点以下4桁まで求めよ

その1：1.0005^5

その2：$\sqrt{2.0006}$

答え: $1.0005^5 \simeq 1.0025 \qquad \sqrt{2.0006} \simeq 1.4144$

例題

例えば

$$1.0005^5 \simeq 1 + 5 \times 0.0005 + 10 \times 0.0005^2 + \cdots$$

10⁻⁶の桁

$$1.0005^5 \simeq 1.0025$$

このような近似計算に使える

よく使われる近似

x^aを1のまわりでテイラー展開する

$$x^a = 1 + a(x-1) + \cdots$$

xが1に充分近ければ，1次までで良い近似になる。

x–1が小さければ，誤差はだいたい $\dfrac{a(a-1)}{2}(x-1)^2$

$$\sqrt{1.1} \simeq 1 + \frac{1}{2} \times 0.1 = 1.05$$

誤差を見積ると $\left| -\frac{1}{2} \times \frac{1}{2} \times 0.1^2 \right| = 0.0025$

つまり $\sqrt{1.1} = 1.05 \pm 0.0025$

↖ **ばっちり**

正確には $\sqrt{1.1} = 1.04881 \cdots$

工夫しだいで便利

$$\sqrt{2.1} = \sqrt{2}\sqrt{1.05} \simeq 1.414 \times (1 + 0.025) \simeq 1.44935$$

正確には$\sqrt{2.1} = 1.44914\cdots$

とにかく $(1+\Delta)^a$ の形を作り出せば

$$(1+\Delta)^a \simeq 1 + a\Delta$$

が使える

例:音速

気体の断熱過程を仮定すると，温度T[K]のときの音速は

$$v(T) = \sqrt{\frac{\gamma RT}{M}}$$

のように表される。　γ:比熱比 R:気体定数 M:分子量

温度Tを摂氏温度t[°C]で表すと，$T = t + 273.15$

$$v(T) = \sqrt{\frac{\gamma R}{M}}\sqrt{273.15 + t} \simeq \sqrt{\frac{\gamma R \times 273.15}{M}}\left(1 + \frac{1}{2}\frac{t}{273.15}\right)$$

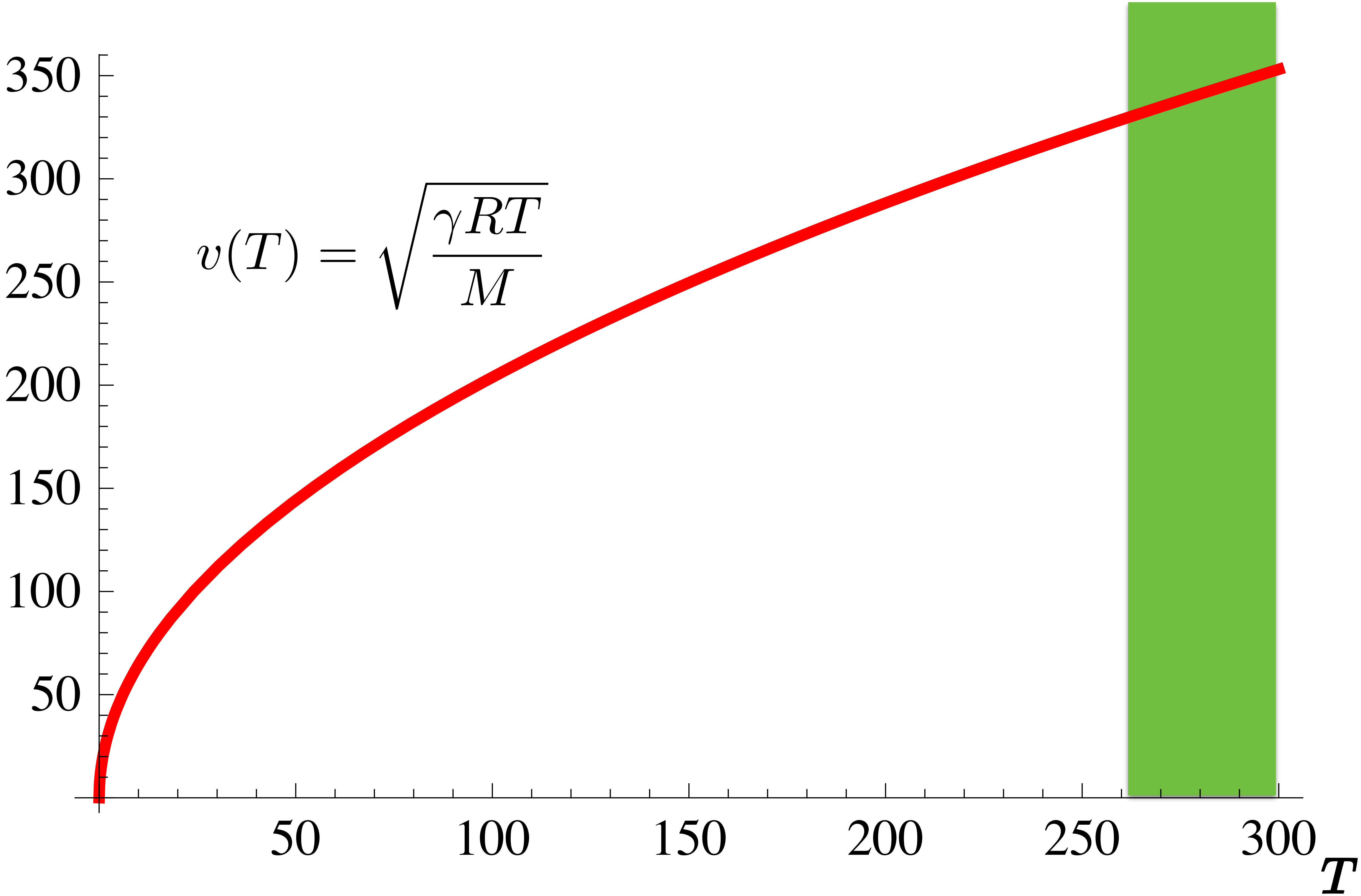
窒素の場合，

$$v \simeq 336.89 + 0.62t$$

例:音速

ほぼ直線

$$v \simeq 336.89 + 0.62t$$



$$v(T) = \sqrt{\frac{\gamma RT}{M}}$$

マクローリン展開

x=0のまわりのテイラー展開をマクローリン展開という

$$
\begin{aligned}
f(x) =& \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{d^k f(0)}{dx^k} \right) x^k \\
=& f(0) + \frac{df(0)}{dx} x + \frac{1}{2} \frac{d^2 f(0)}{dx^2} x^2 + \cdots + \frac{1}{k!} \left(\frac{d^k f(0)}{dx^k} \right) x^k + \cdots
\end{aligned}
$$

三角関数の展開

$\sin x$と$\cos x$のマクローリン展開を求めてみよう

$$\frac{d\cos x}{dx} = -\sin x \qquad \frac{d\sin x}{dx} = +\cos x$$

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \cdots + (-1)^k \frac{1}{(2k+1)!} x^{2k+1} + \cdots$$

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \cdots + (-1)^k \frac{1}{2k!} x^{2k} + \cdots$$

指数関数の展開

e^xのマクローリン展開を求めてみよう

$$\frac{de^x}{dx} = e^x$$

$$e^x = 1 + x + \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 + \cdots + \frac{1}{k!}x^k + \cdots$$

収束半径について

sin$x$, cos$x$, e^xの展開については，収束半径が∞なので，展開の次数を上げていくことで，どんなxの値に対しても，近似の精度を上げられる。

しかし，例えばlog(1+x)は収束半径が1なので，xが1を超える場合には，いくら展開の次数を上げても，近似はよくならない。

$$\log(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} - \frac{x^5}{5} + \frac{x^6}{6} + \cdots$$

級数展開とオイラーの公式

$\sin x$, $\cos x$, e^xの展開を利用すると，

$$e^{ix} = \cos x + i \sin x$$

が示せる。

$$\begin{aligned} e^{ix} &= 1 + (ix) + \frac{(ix)^2}{2!} + \frac{(ix)^3}{3!} + \cdots \\ &= 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} + \cdots \\ &\quad + i\left(x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \cdots\right) \end{aligned}$$