自然科学の歩き方
第４回

2019年

第1クォーター

金曜４クラス

前回の実習

- モデル$I = aV$の直線の傾きaを何通りか変え、それぞれについて二乗誤差Eを計算

以下の値は記録されていますね？

a	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06
E	0.076750	0.018823	0.001846	0.025819	0.090742

今回の話

- 前回のように計算した二乗誤差から
  どのようにして「最適な」パラメータ（a）を決めるか？その考え方。

- 「良い」モデルが何か、どのように決めるか？

- 「最小二乗法」の考え方と定式化

良いモデルの条件（復習）

- 理論的な根拠がある
・・・ ただし，いつもそうではない。この話はとりあえずおいておく。
- 実験データをそれなりに再現する
・・・ そして，「予測」にも使える
- パラメータが「ほどほどに」少ない
・・・オッカムの剃刀（Occam's razor）「ある事柄を説明するためには、必要以上に多くを仮定するべきでない」。

二乗誤差

変量 x, y の間の関係を測定し，n 組のデータを得た。

(x_1, y_1)，(x_2, y_2)，$\cdots$ (x_n, y_n)

また，両者の関係としてモデル $y = f(x)$を考える。

二乗誤差 E は以下の式で与えられる

$$E = \sum_{k=1}^{n} (y_k - f(x_k))^2$$

より一般的な二乗誤差（今日は使わない）

変量 x, y の間の関係を測定し，ｎ組のデータを得た。測定には誤差があり，個々の値は以下のように表現される。d_kがk番目の測定値の誤差である。

$$(x_k, y_k \pm d_k) \quad (k = 1, 2, \ldots, n)$$

また，両者の関係としてモデル $y = f(x)$を考える。

二乗誤差 E は以下の式で与えられる

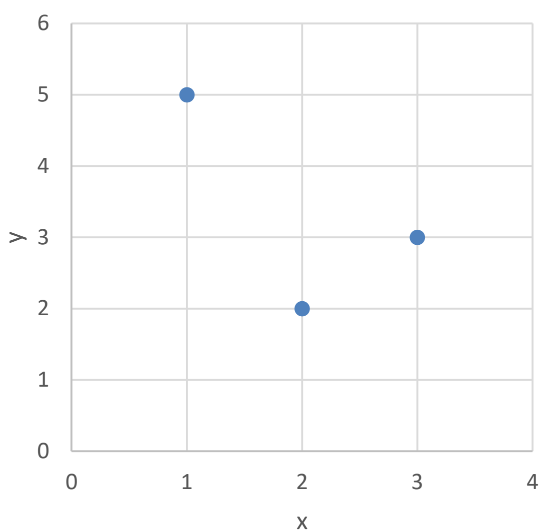
$$E = \sum_{k=1}^{n} \frac{(y_k - f(x_k))^2}{d_k^2}$$

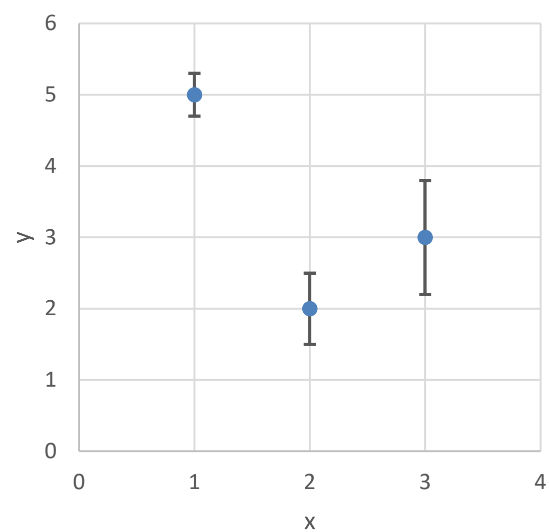
今使っている二乗誤差はすべての測定点の誤差が等しいと仮定したものと見なせる。

誤差をグラフで表示する

x	y
1	5
2	2
3	3

x	y	d
1	5	0.3
2	2	0.5
3	3	0.8





誤差を表示するのに「誤差棒」を使う

最適なモデルとは？

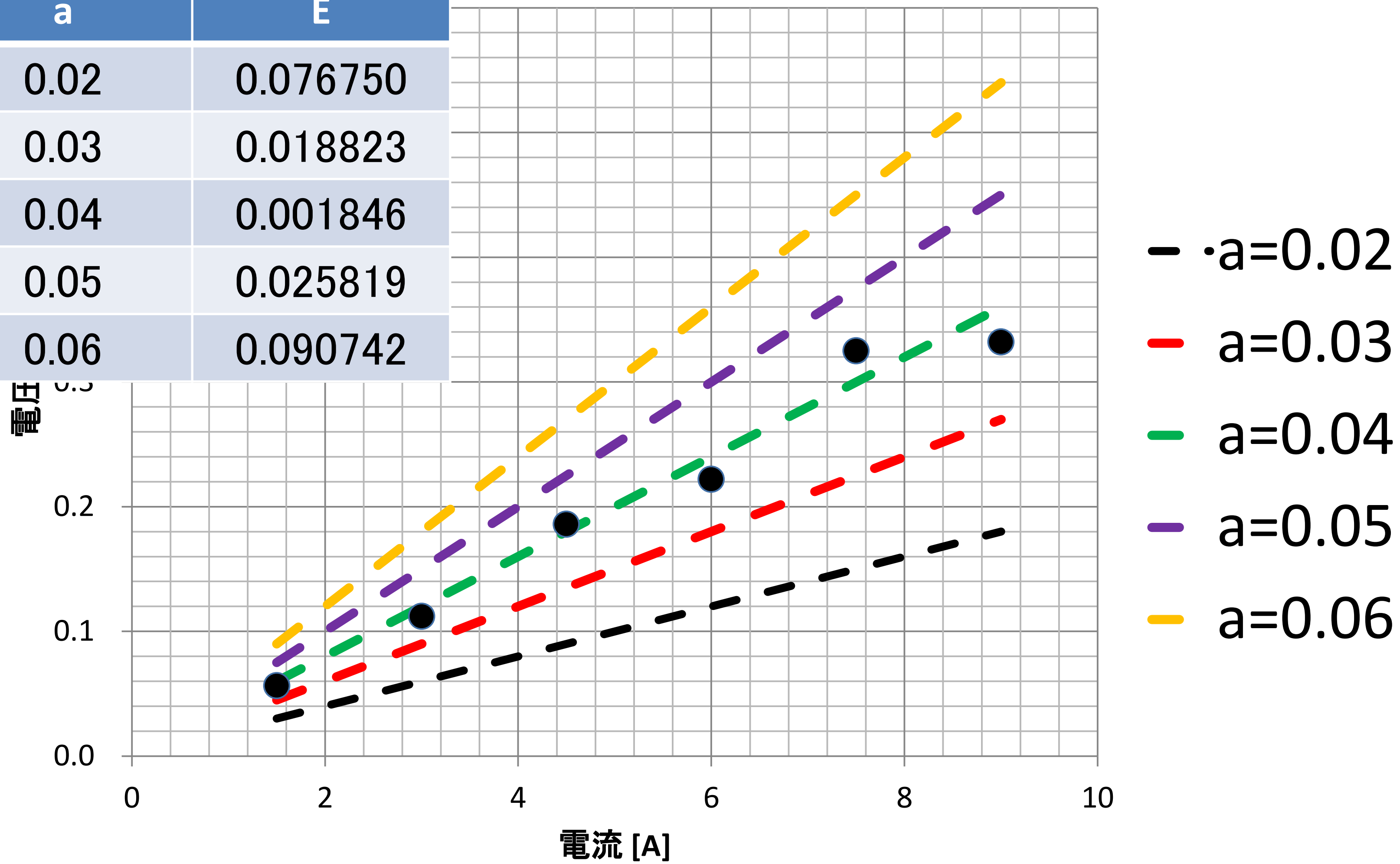
$$E = \sum_{k=1}^{n} (y_k - f(x_k))^2$$

モデル $y = f(x)$ はパラメータを含んでいる。

目標：最適なパラメタを決定したい。

前回の演習の結果

a	E
0.02	0.076750
0.03	0.018823
0.04	0.001846
0.05	0.025819
0.06	0.090742



最適なモデルとは？

$$E = \sum_{k=1}^{n} (y_k - f(x_k))^2$$

モデル $y = f(x)$ はパラメータを含んでいる。
目標：最適なパラメタを決定したい。

前回の結果：Eが小さいと，モデルとデータはより一致している。

方針：二乗誤差を最小にするパラメータが最適なものである。

最小自乗法

$$E=\sum_{k=1}^{n}(y_k-f(x_k))^2$$

方針：二乗誤差を最小にするパラメータが最適なものである。

モデル $y=f(x)$ はパラメータを含んでいる。

パラメタは s 個あり，　$a_1,a_2,\ldots,a_s$　である。

数学）最適なパラメータは，連立方程式

$$\frac{\partial E}{\partial a_j}=0 \quad (j=1,2,\ldots,s)$$

を解くことにより決定される

線形最小自乗法

モデル関数が以下の形をしている場合

$$f(x) = a_1 p_1(x) + a_2 p_2(x) + \cdots + a_s p_s(x)$$

$$p_1 = 1 \quad p_2 = x \quad \cdots \quad p_s = x^{s-1}$$

とすれば，モデル関数は（ｓ－１）次の多項式

このとき二乗誤差は以下となる。

$$E = \sum_k y_k^2 - 2\sum_j a_j \sum_k y_k p_j(x_k)$$

$$+ \sum_{j,j'} a_j a_{j'} \sum_k p_j(x_k) p_{j'}(x_k)$$

パラメータ $a_1, a_2, \ldots, a_s$
は次の連立方程式を解くことにより決まる

$$\begin{cases} M_{11}a_1 + M_{12}a_2 + \cdots + M_{1s}a_s = b_1 \\ M_{21}a_1 + M_{22}a_2 + \cdots + M_{2s}a_s = b_2 \\ \qquad\qquad\vdots \\ M_{s1}a_1 + M_{s2}a_2 + \cdots + M_{ss}a_s = b_s \end{cases}$$

$$M_{jj'} = \sum_k p_j(x_k) p_{j'}(x_k) \qquad b_j = \sum_k y_k p_j(x_k)$$

演習（1）

それでは，一般論はこれまでにして，当面の電圧・電流の関係に戻る。

まず，前回の結果を横軸をa，縦軸をEとして2枚目のグラフ用紙に記入せよ。
軸のとりかたや範囲は，
１回目の授業の注意を思い出すこと。

a	E
0.02	0.076750
0.03	0.018823
0.04	0.001846
0.05	0.025819
0.06	0.090742

どんな形のグラフになるか？

今の電圧－電流モデル

k	1	2	3	4	5	6
電圧 V_k	1.5	3	4.5	6	7.5	9
電流 I_k	0.0564	0.112	0.186	0.222	0.325	0.332

モデル　$I = aV$　　決定すべきパラメータ　a

$$E = \sum_{k=1}^{6} (I_k - aV_k)^2$$

この式からEはａの関数として，どんな関数か答えよ。
さきほど描いたグラフも見よ。

演習(2)

$$E = \sum_{k=1}^{6}(I_k - aV_k)^2$$ を $$E = Aa^2 + Ba + C$$ と表す。

- A, B, Cの数値を計算せよ。まず，A, B, C を表す式を書き，それから数値を計算する。

上に基づき課題の(2)，(3)を考える。

- A, B, Cが正しいか検算せよ。$a = 0.02$などとして，二乗誤差の値が再現されるか確認せよ。
- E の極小を与えるaの値と，そのときのEの値を求め，グラフに書き込め。 → 課題(3)
- 必要と思ったら，まだ結果がないaの値でいくつかEを計算してグラフに書き込め。そしてそれらの点を滑らかにつなげよ。 → 課題(2)

E

二乗誤差は何の関数か？

- 実験（測定）値は決まっている
- 変えているものは、I=aV の傾き a
- 二乗誤差は、a の二次関数

$$
\begin{aligned}
E(a) &= \sum_{i=1}^{6} (I_i - aV_i)^2 \\
&= (I_1 - aV_1)^2 + (I_2 - aV_2)^2 + (I_3 - aV_3)^2 + \cdots \\
&= a^2(V_1^2 + V_2^2 + \cdots) - 2a(I_1V_1 + I_2V_2 + \cdots) + (I_1^2 + I_2^2 + \cdots)
\end{aligned}
$$

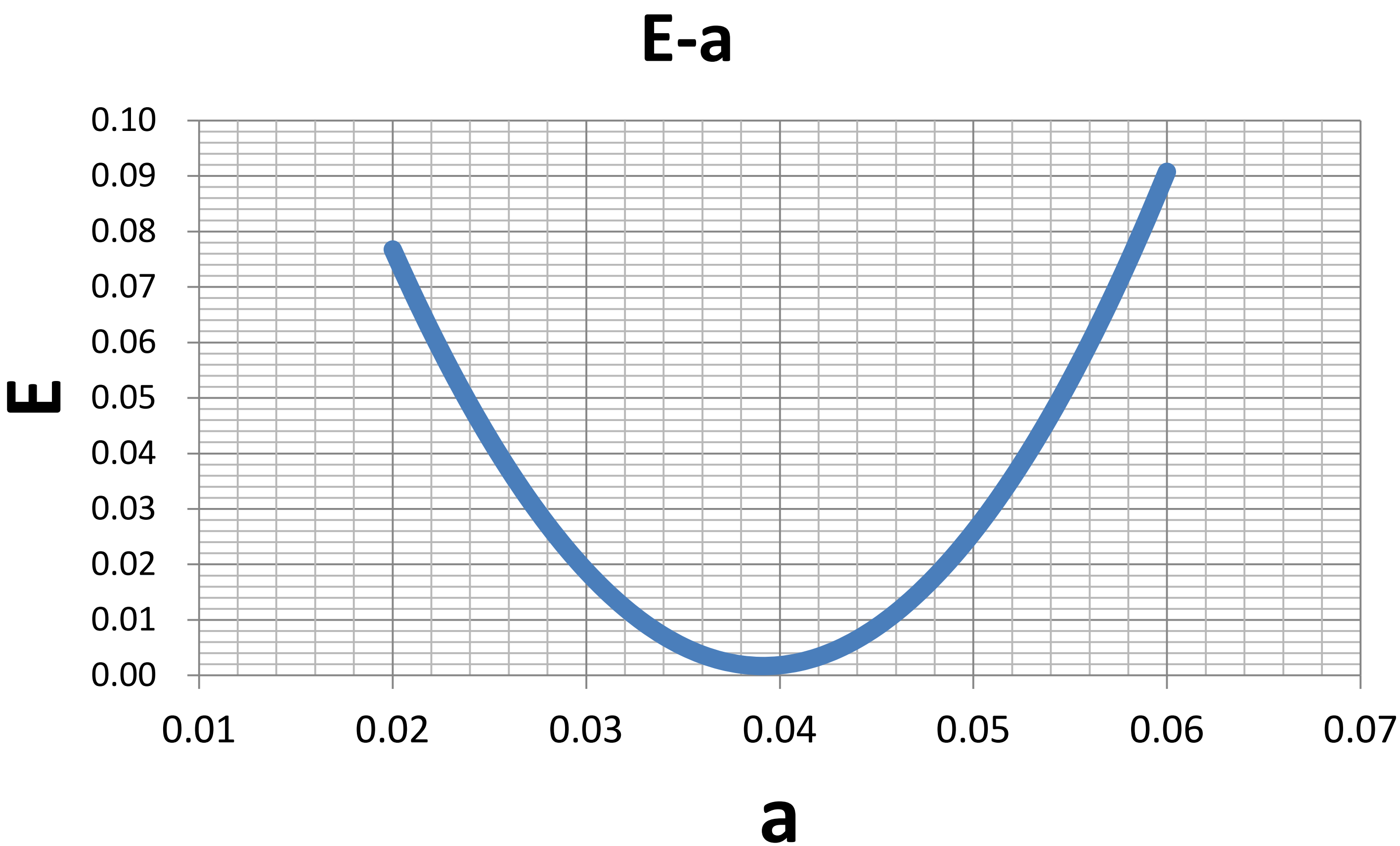
二乗誤差を最小にするパラメータ

- 二乗誤差 E は、傾き a の関数
- 最小値を求めるには:
  - E を a で微分して、ゼロになるような a の値を求める
  - （二次関数だったら平方完成でも良い）

$$\frac{dE}{da} = 0$$

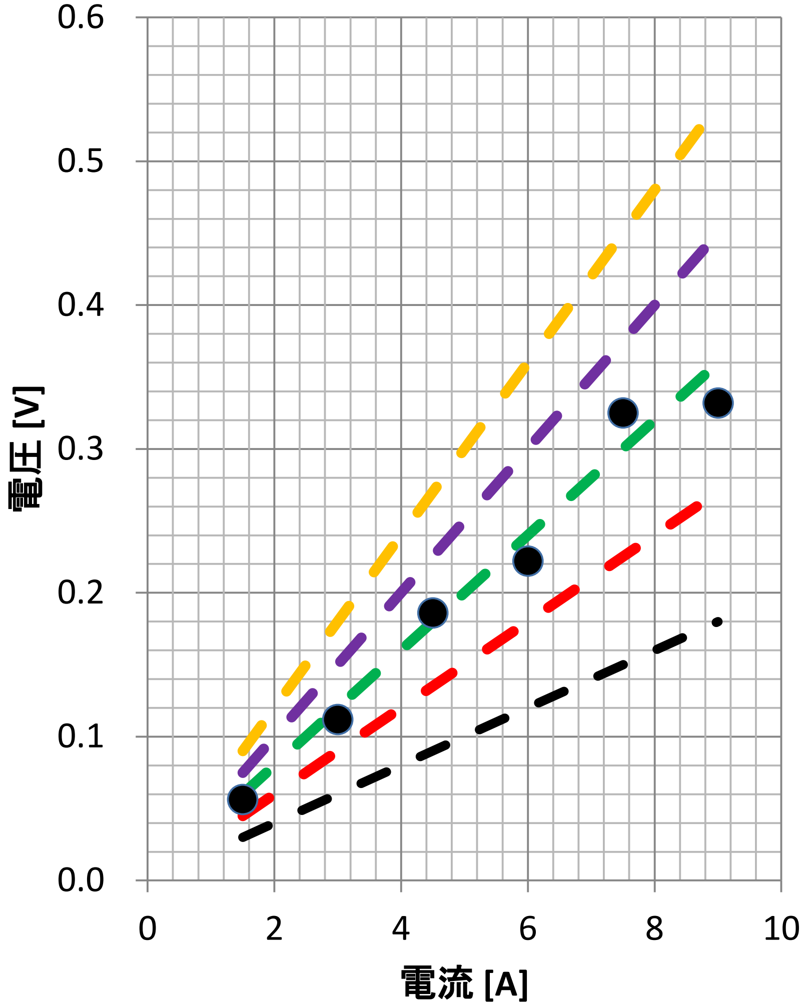
$$\frac{dE}{da} = 2a(V_1^2 + V_2^2 + \cdots) - 2(I_1V_1 + I_2V_2 + \cdots) = 0$$

二乗誤差の振る舞い



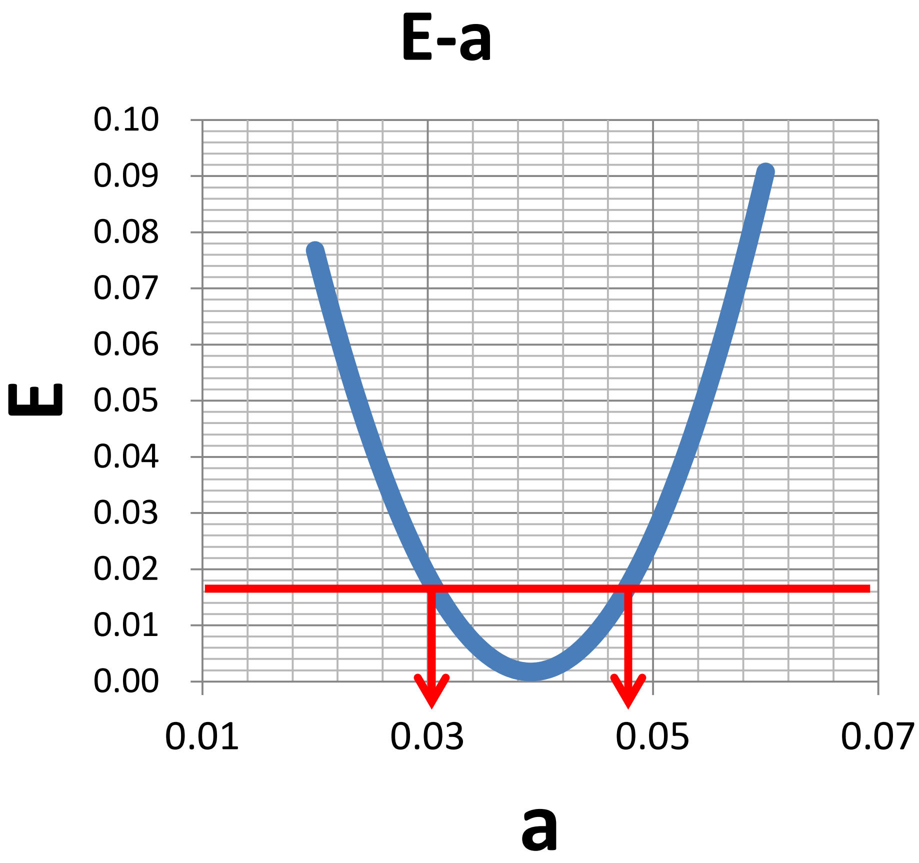
最も良い a の値は、二乗誤差 E が最小になるところ

パラメータ推定の誤差



- どうせ、モデルの線は、測定点を完全には通らない
- 測定にも誤差がある
- パラメータ推定も、「厳密にコレ」とは決まらない

パラメータ推定の誤差



- 「二乗誤差がある値以下になる範囲」として、「それらしいａの値」を決める
  - ここは、あまり詳しくはやりません

モデル当てはめの上での注意

- データから何か言う時は、何らかのモデルが常に必要になる
- **考えるモデル（前提）により、言うことは異なる**
  - ここが、自然科学で常に議論になる
- モデルが今のデータにどのくらいよく当てはまるか？
  - 測定誤差は？モデルの誤差は？
- モデルを検証するために、どのような実験が新たに必要か？