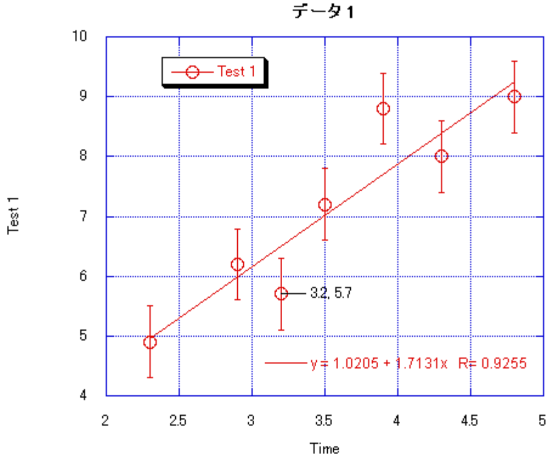
最小二乘法

ばらついた測定点にモデル関数（例：直線）をあてはめる

- 仮定
  - 理論的には直線関係$Y = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 x$が成り立つとする
  - 測定すると様々な理由でばらつきがでる
    - Xの測定値は正確な値とする.
    - Xを固定して測定（試行）すると，値がばらつく
    - 測定値は試行回数を増やすと，正規分布に従って分布する
    - 正規分布の分散はXによらず一定とする
    - 異なるXでの測定は互いに独立とする
- 課題
  - Xを変えて測定した結果（図）からもっともらしいパラメータa_0とa_1を推定する



最小二乗法の手順　1

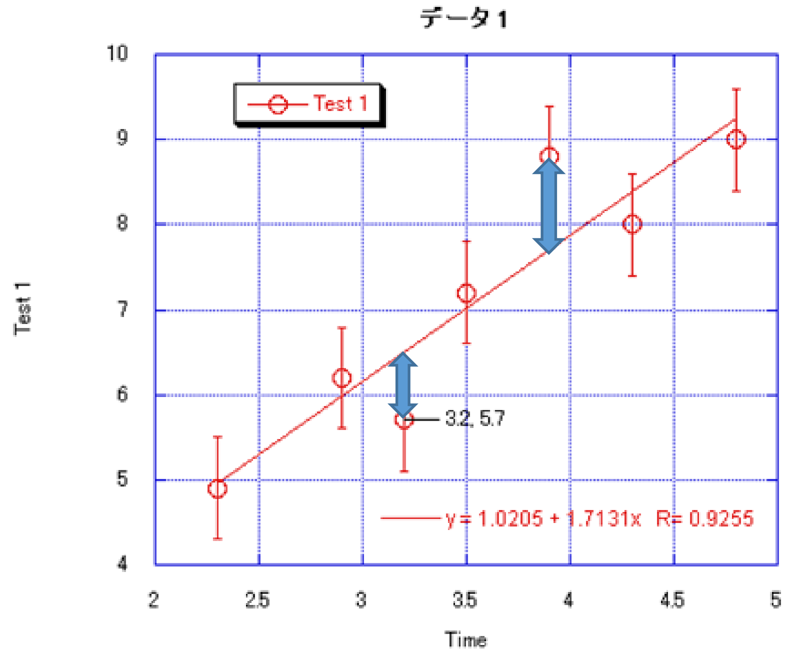
- 測定値の組
  - $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \cdots, (x_N, y_N)$
    - $y_k : x_k$で，（分散が他と同じになるまで）何度も測定した平均

- 方針

$$z(a_0, a_1) \equiv \sum_{k=1}^{N} (y_k - a_0 - a_1 x_k)^2$$

を最小にするa_0とa_1の値を

真の値$\hat{a}_0$と$\hat{a}_1$の推定値とする.



最小法の手順 2

- $z(a_0, a_1) \equiv \sum_{k=1}^{N} (y_k - a_0 \ - a_1 x_k)^2$

が最小になる位置では $\frac{\partial z}{\partial a_0} = 0, \frac{\partial z}{\partial a_1} = 0$

$$z(a_0, a_1) = \sum \{y_k^2 + a_0^2 + a_1^2 x_k^2 - 2a_0 y_k - 2a_1 x_k y_k + 2a_0 a_1 x_k\}$$

$$\frac{\partial z}{\partial a_0} = 2\sum \{a_0 - y_k + a_1 x_k\} = 0 \rightarrow \quad N \cdot a_0 + \left(\sum x_k\right) a_1 = \sum y_k$$

$$\frac{\partial z}{\partial a_1} = 2\sum \{a_1 x_k^2 - x_k y_k + a_0 x_k\} = 0 \quad \rightarrow \left(\sum x_k\right) \cdot a_0 + \left(\sum x_k^2\right) a_1 = \sum x_k y_k$$

Q1

$z(a_0, a_1) \equiv \sum_{k=1}^{N}(y_k - a_0 \ - a_1 x_k)^2,\ \ \frac{\partial z}{\partial a_0} = 0, \frac{\partial z}{\partial a_1} = 0$

から

$$N \cdot a_0 + \left(\sum x_k\right) a_1 = \sum y_k\ , \quad \left(\sum x_k\right) \cdot a_0 + \left(\sum x_k^2\right) a_1 = \sum x_k y_k$$

を導出し，a_0とa_1を解け.

A1

$$N \cdot a_0 + \left(\sum x_k\right) a_1 = \sum y_k$$

$$\left(\sum x_k\right) \cdot a_0 + \left(\sum x_k^2\right) a_1 = \sum x_k y_k$$

$\Delta \equiv N \sum x_k^2 - \left(\sum x_k\right)^2$とすると

$$a_0 = \frac{1}{\Delta}\left\{\left(\sum x_k^2\right)\left(\sum y_k\right) - \left(\sum x_k\right)\left(\sum x_k y_k\right)\right\}$$

$$a_1 = \frac{1}{\Delta}\left\{N\left(\sum x_k y_k\right) - \left(\sum x_k\right)\left(\sum y_k\right)\right\}$$

Q2 測定値(0,1), (1,3), (1,4)に最小二乗法で直線をフィットせよ

$$a_0 = \frac{\left(\sum x_k^2\right)\left(\sum y_k\right) - \left(\sum x_k\right)\left(\sum x_k y_k\right)}{N \sum x_k^2 - \left(\sum x_k\right)^2}, a_1 = \frac{N\left(\sum x_k y_k\right) - \left(\sum x_k\right)\left(\sum y_k\right)}{N \sum x_k^2 - \left(\sum x_k\right)^2}$$

表の空欄を埋め，a_0とa_1を計算し，測定値と直線（回帰直線）をグラフに記せ

x	**0**	**1**	**2**	$\sum \boldsymbol{x} =$
y	1	3	4	$\sum \boldsymbol{y} =$
x^2				$\sum \boldsymbol{x}^2 =$
xy				$\sum \boldsymbol{xy} =$

Q2

$$a_0 = \frac{(\sum x_k^2)(\sum y_k) - (\sum x_k)(\sum x_k y_k)}{N\sum x_k^2 - (\sum x_k)^2},$$

$$a_1 = \frac{N(\sum x_k y_k) - (\sum x_k)(\sum y_k)}{N\sum x_k^2 - (\sum x_k)^2}$$

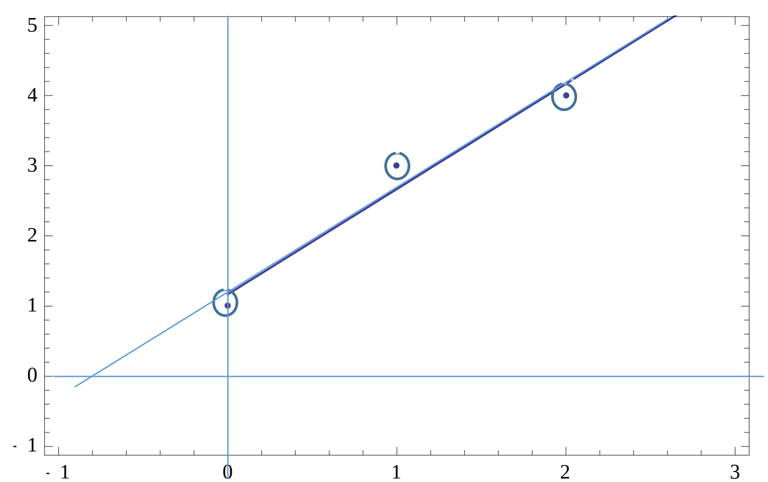
N=3

x	**0**	**1**	**2**	$\sum x = 3$
y	1	3	4	$\sum y = 8$
x^2	0	1	4	$\sum x^2 = 5$
xy	0	3	8	$\sum xy = 11$

$$a_0 = \frac{5\cdot 8 - 3\cdot 11}{3\cdot 5 - 3^2} = \frac{7}{6},$$

$$a_1 = \frac{3\cdot 11 - 3\cdot 8}{3\cdot 5 - 3^2} = \frac{9}{6} = \frac{3}{2}$$

$$y = \frac{7}{6} + \frac{3}{2}x$$



測定値(x_k, y_k)を得る確率

- 正規分布
  - 期待値 = 真の値$(\hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_k)$
  - 分散 = σ_k^2

$$\mathrm{P}[(x_k, y_k)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_k} e^{-\frac{(y_k - (\hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_k))^2}{2\sigma_k^2}}$$

測定値の組 $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \cdots (x_N, y_N)$ を得る確率

- k番目のデータは他と独立としたので

$$P = P_1 \times P_2 \times \cdots \times P_N$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}^N \sigma_1 \sigma_2 \cdots \sigma_N} e^{-\frac{1}{2}\left\{\frac{\Delta y_1^2}{\sigma_1^2} + \frac{\Delta y_2^2}{\sigma_2^2} + \cdots + \frac{\Delta y_N^2}{\sigma_N^2}\right\}}$$

$$\Delta y_k \equiv (y_k - \hat{a}_0 - \hat{a}_1 x_k)^2$$

測定（試行）は，Pが最大であるようにして起きた：

$$\chi^2 \equiv \left\{\frac{\Delta y_1^2}{\sigma_1^2} + \frac{\Delta y_2^2}{\sigma_2^2} + \cdots + \frac{\Delta y_N^2}{\sigma_N^2}\right\}$$ が最小

非線形最小二乗法

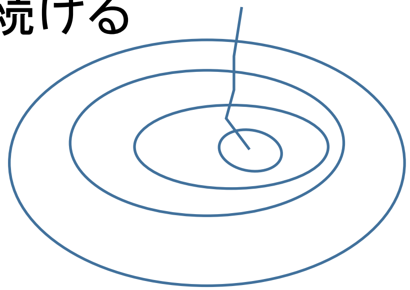
$\sum \frac{1}{\sigma_k^2}\{y_k - (\hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_k)\}^2$ が最小

↓

$\chi^2(\hat{a}_0, \hat{a}_1, \hat{a}_2, \cdots) \equiv \sum \frac{1}{\sigma_k^2}\{y_k - f(x_k, ; \hat{a}_0, \hat{a}_1, \hat{a}_2, \cdots)\}^2$ が最小

パラメータ空間 $(\hat{a}_0, \hat{a}_1, \hat{a}_2, \cdots)$ の内部で χ^2 の最小値が実現される位置を探索する

- たとえば，$-\nabla\chi^2$ が最大となる方向に進み続ける



標本平均と不偏分散

- 標本平均

$$\mu_N = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} x_k \to E[X]$$

- 不偏分散

$$\sigma_N^2 = \frac{1}{N-1}\sum_{k=1}^{N} (x_k - \mu)^2 \to V[X]$$

- 真の期待値mの推定（2/3の確率で）

$$\mu_N - \sigma_N < m < \mu_N + \sigma_N$$