最小二乗法（1）

最小二乗法

複数の計測値の誤差が異なる場合

- 同じ対象に対する同じ計測
  ⇒同じ誤差をもつ計測
  このときには平均値が最尤推定量となる
- では同じ量を2つの方法で計測したら？
  ⇒一般にはそれぞれの計測誤差は異なる

（疑問）
その場合の最尤推定量は平均値でよいか？

複数の計測値の誤差が異なる場合

- 計測手法A： $x = x_A \pm \sigma_A$
- 計測手法B： $x = x_B \pm \sigma_B$

  誤差は正規分布してσはその標準偏差とする

もし、x_Aが$x_B \pm 2\sigma_B$の範囲に入らなければ
この2測定は95%の信頼度で不一致だという
（つじつまがあわない） (inconsistent)

複数の計測値の誤差が異なる場合

計測手法Aで
x_Aの得られる確率

$$P_X(x_A) \propto \frac{1}{\sigma_A}\exp(-\frac{(x_A - X)^2}{2\sigma_A^2})$$

計測手法Bで
x_Bの得られる確率

$$P_X(x_B) \propto \frac{1}{\sigma_B}\exp(-\frac{(x_B - X)^2}{2\sigma_B^2})$$

x_A,x_Bがともに得られる確率（同時確率）：独立なら積になる

$$P_X(x_A, x_B) \propto \frac{1}{\sigma_A \sigma_B}\exp\left(-\frac{(x_A - X)^2}{2\sigma_A^2} - \frac{(x_B - X)^2}{2\sigma_B^2}\right)$$

複数の計測値の誤差が異なる場合

x_A, x_Bがともに得られる確率（同時確率）：独立なら積になる

$$P_X(x_A, x_B) \propto \frac{1}{\sigma_A \sigma_B} \exp\left(-\frac{(x_A - X)^2}{2\sigma_A^2} - \frac{(x_B - X)^2}{2\sigma_B^2} \right)$$

これを最大にするXを求める（最尤性原理）。すなわち、

$$\chi^2 = \frac{(x_A - X)^2}{\sigma_A^2} + \frac{(x_B - X)^2}{\sigma_B^2}$$

カイ二乗：
残差を標準偏差で
割ったものの二乗和

を最小にするXを求めるのと等価

⇒ 最小二乗法（Least Squares）という

最小二乗法による最尤推定

$$\chi^2 = \frac{(x_A - X)^2}{\sigma_A^2} + \frac{(x_B - X)^2}{\sigma_B^2} \quad \Rightarrow \text{最小化}$$

$$\frac{d(\chi^2)}{dX} = -2\left\{ \frac{x_A - X}{\sigma_A} + \frac{x_B - X}{\sigma_B} \right\} = 0$$

$$\therefore X = \left(\frac{x_A}{\sigma_A^2} + \frac{x_B}{\sigma_B^2} \right) \Big/ \left(\frac{1}{\sigma_A^2} + \frac{1}{\sigma_B^2} \right)$$

加重平均

$w_A = \frac{1}{\sigma_A^2}, \quad w_B = \frac{1}{\sigma_B^2}$ とおくと

$$\boxed{X = x_{wav} = \frac{w_A x_A + w_B x_B}{w_A + w_B}}$$

最小二乗法と加重平均（一般の場合）

計測誤差のことなる複数の計測値

$$x = x_i \pm \sigma_i \qquad i = 1, \cdots, N$$

が得られたとき、xの最尤推定量は最小二乗法により求まり、計測誤差の分散の逆数を重みとした加重平均で与えられる。

$$x_{wav} = \frac{\sum_{i=1}^N w_i x_i}{\sum_{i=1}^N w_i}, \qquad w_i = \frac{1}{\sigma_i^2}$$

加重平均の分散、標準偏差

$$x_{wav} = \frac{\sum_{i=1}^N w_i x_i}{\sum_{i=1}^N w_i}, \qquad w_i = \frac{1}{\sigma_i^2}$$

一般関数の誤差伝播則を思い出せば…

$$\sigma_{wav} = \sqrt{\sum \left(\frac{dx_{wav}}{dx_i} \sigma_i \right)^2} = \sqrt{\sum \left(\frac{w_i}{\sum w_i} \sigma_i \right)^2}$$

$$= \sqrt{\frac{\sum w_i}{\left(\sum w_i\right)^2}} = \frac{1}{\sqrt{\sum w_i}} = \frac{1}{\sqrt{\sum 1/\sigma_i^2}}$$

加重平均の分散は、

それぞれの分散の逆数の和の逆数

加重平均の分散、標準偏差

$$x_{wav} = \frac{\sum_{i=1}^{N} w_i x_i}{\sum_{i=1}^{N} w_i}, \quad w_i = \frac{1}{\sigma_i^2}$$

$$\sigma_{wav} = \frac{1}{\sqrt{\sum \frac{1}{\sigma_i^2}}}$$

σ wavの性質

$$\sigma_{wav}^2 - \sigma_1^2 = \frac{1}{\frac{1}{\sigma_1^2} + \frac{1}{\sigma_2^2}} - \sigma_1^2 = \frac{\sigma_1^2 \sigma_1^2}{\sigma_1^2 + \sigma_2^2} - \sigma_1^2$$

$$= \frac{\sigma_1^2 \sigma_2^2 - \sigma_1^2(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)}{\sigma_1^2 + \sigma_2^2} = -\frac{\sigma_1^2}{\sigma_1^2 + \sigma_2^2} < 0$$

$$\therefore \sigma_{wav}^2 < \sigma_1^2$$

N個の場合でも同様に成立

加重平均の分散は、個々の測定値の分散よりも必ず小さくなる！

⇒どんな計測も推定を確からしくすることに貢献する！

ここでチェック：加重平均

同一の電気抵抗値を3つの方法で計測し次の結果をえた。

R_1=11±1Ω, R_2=12±1Ω, R_3=10±3Ω

この結果から最良推定値を求めよ。

誤差は標準偏差とすると、 $\sigma_1 = \sigma_2 = 1$, $\sigma_3 = 3$

最良推定値は分散の逆数を重みとした加重平均となり、

$w_1 = w_2 = 1$, $w_3 = 1/9$ **より、**

R_{wav} = {(1x11)+(1x12)+(1/9x10)}/(1+1+1/9)

= 11.42Ω

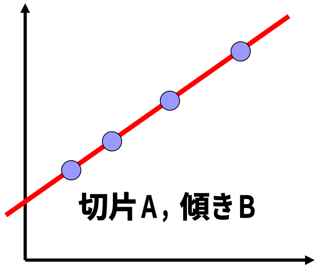
誤差は

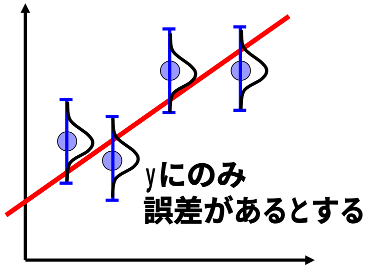
σ_{wav} = 1/√(1+1+1/9)=0.69

よって、丸めれば、 R = 11.4±0.7Ω (答)

直線に当てはまるデータ

- {x_1,y_1},….,{x_N,y_N}**のデータ対が得られたとする。**
  y = A + Bx **へのあてはめ ⇒ 線形回帰**
  (linear regression)





線形回帰：最小二乗法による直線あてはめ

- **もし、**A,B**の値がわかったとすると、**y_i**の真の値が計算できる ⇒**

$$\hat{y}_i = A + Bx_i$$

y_i**の誤差** $\Delta y_i = y_i - A - Bx_i$

が σ_y**に従う正規分布とすると、**y_i**が得られる確率は**

$$P_{A,B}(y_i) \propto \frac{1}{\sigma_y} \exp\left(-\frac{(y_i - A - Bx_i)^2}{2\sigma_y^2}\right)$$

線形回帰：最小二乗法による直線あてはめ

- $\{x_1,y_1\},\ldots,\{x_N,y_N\}$の互いに独立なデータ対の発生する確率 (同時確率) は

$$P_{A,B}(y_1,\cdots,y_N)\propto P_{A,B}(y_1)\cdots P_{A,B}(y_N)\propto \frac{1}{\sigma_y^N}\exp\left(-\frac{\chi^2}{2\sigma_y^2}\right)$$

ただし $\chi^2=\sum\frac{(y_i-A-Bx_i)^2}{\sigma_y^2}$

最尤性原理より、χ^2を最小にするA，Bを求めるとよい。
⇒すなわち最小二乗法

線形回帰：最小二乗法による直線あてはめ

$$\chi^2=\sum\frac{(y_i-A-Bx_i)^2}{\sigma_y^2}$$

$$\frac{d(\chi^2)}{dA}=\frac{-2}{\sigma_y^2}\sum(y_i-A-Bx_i)=0\qquad \frac{d(\chi^2)}{dB}=\frac{-2}{\sigma_y^2}\sum x_i(y_i-A-Bx_i)=0$$

正規方程式

$$\boxed{\begin{aligned}AN+B\sum x_i&=\sum y_i\\ A\sum x_i+B\sum x_i^2&=\sum x_iy_i\end{aligned}}$$

最尤推定解

$$\boxed{\begin{gathered}A=\frac{\sum x_i^2\sum y_i-\sum x_i\sum x_iy_i}{\Delta},\quad B=\frac{N\sum x_iy_i-\sum x_i\sum y_i}{\Delta}\\ \Delta=N\sum x_i^2-\left(\sum x_i\right)^2=N\sum(x_i-\bar{x})^2\end{gathered}}$$

右の4つの値を求めればよい。 $\sum x_i,\sum y_i,\sum x_i^2,\sum x_iy_i$

多重回帰

データ $\{(x_i,y_i,z_i)\}\quad(i=1,\ldots N)$ zにのみ誤差があるとする

当てはめ式 $z=A+\underline{Bx+Cy}$

独立変数が2つ

$$\chi^2=\sum_{i=1}^{N}\frac{(z_i-A-Bx_i-Cy_i)^2}{\sigma_z^2}\ \Rightarrow \text{minimize}$$

最小二乗法

$$\frac{\partial(\chi^2)}{\partial A}=\frac{\partial(\chi^2)}{\partial B}=\frac{\partial(\chi^2)}{\partial C}=0$$

まったく同じように計算できる

多項式による最小二乗当てはめ

データ $\{(x_i,y_i)\}(i=1,\ldots N)$

当てはめ式 $y=A+Bx+Cx^2+\cdots+Hx^n$

$$\chi^2=\sum_{i=1}^{N}\frac{(y_i-A-Bx_i-Cx_i^2-\cdots-Hx_i^n)^2}{\sigma_y^2}\ \Rightarrow \text{minimize}$$

最小二乗法

$$\frac{\partial(\chi^2)}{\partial A}=\frac{\partial(\chi^2)}{\partial B}=\frac{\partial(\chi^2)}{\partial C}=\cdots=\frac{\partial(\chi^2)}{\partial H}=0$$

指数関数による最小二乗当てはめ

データ $\{(x_i, y_i)\}(i=1,\ldots N)$

対数をとる

当てはめ式 $y = A\exp(Bx) \Leftrightarrow \ln y = \ln A + Bx$

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} \frac{(\ln y_i - \ln A - Bx_i)^2}{\sigma_{\ln y}^2} \Rightarrow \text{minimize}$$

最小二乗法

$$\frac{\partial(\chi^2)}{\partial A} = \frac{\partial(\chi^2)}{\partial B} = 0$$

線形回帰における測定誤差の見積もり

- 線形回帰（最小二乗法）で、A,Bの値がわかれば、測定値y_iの真の値が計算できる

$$\hat{y}_i = A + Bx_i$$

y_iの誤差

$$\Delta y_i = y_i - A - Bx_i$$

の不偏分散の平方根は、

$$\sigma_y = \sqrt{\frac{1}{N-2}\sum_{i=1}^{N}(y_i - Ax_i - B)^2}$$

N個のデータからA,Bを決めたので、独立なデータはN-2個

推定値A,Bの誤差

- 測定値yiの誤差がわかれば、線形回帰係数A,Bの推定誤差も見積もれる

$$y = A + Bx$$

$$A = \frac{\sum x_i^2 \sum y_i - \sum x_i \sum x_i y_i}{\Delta}, \quad \Delta = N\sum x_i^2 - \left(\sum x_i\right)^2$$

誤差伝播の一般式を使えば、

$$\sigma_A = \sqrt{\sum\left(\frac{\partial A}{\partial x_i}\sigma_x\right)^2 + \sum\left(\frac{\partial A}{\partial y_i}\sigma_y\right)^2} = \frac{\sigma_y}{\Delta}\sqrt{\sum_i\left(\sum x^2 - \left(\sum x\right)x_i\right)^2}$$

$$= \frac{\sigma_y}{\Delta}\sqrt{\left(\sum x^2\right)\Delta} = \sigma_y\sqrt{\frac{\sum x^2}{\Delta}}$$

推定値A,Bの誤差

- 測定値yiの誤差がわかれば、線形回帰係数A,Bの推定誤差も見積もれる

$$y = A + Bx$$

$$B = \frac{N\sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{\Delta}, \quad \Delta = N\sum x_i^2 - \left(\sum x_i\right)^2$$

誤差伝播の一般式を使えば、

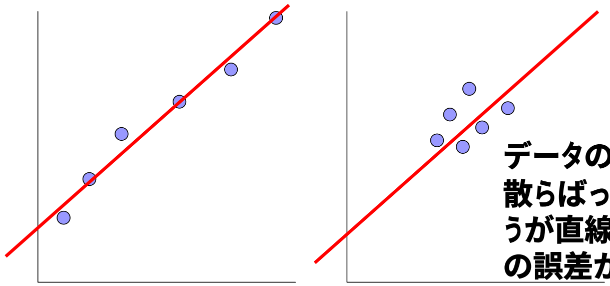
$$\sigma_B = \sqrt{\sum\left(\frac{\partial B}{\partial x_i}\sigma_x\right)^2 + \left(\frac{\partial B}{\partial y_i}\sigma_y\right)^2} = \frac{\sigma_y}{\Delta}\sqrt{\sum_i\left(Nx_i - \left(\sum x\right)\right)^2}$$

$$= \frac{\sigma_y}{\Delta}\sqrt{N\Delta} = \sigma_y\sqrt{\frac{N}{\Delta}}$$

Δの意味

xの分散のN^2倍

$$\Delta = N\sum x_i^2 - \left(\sum x_i\right)^2 = N\sum (x_i-\bar{x})^2$$



データのx座標が散らばっているほうが直線当てはめの誤差が少ない

誤差が独立で正規分布するときの誤差伝播則

$$q(x,y)\approx q(X,Y)+\left.\frac{\partial q}{\partial x}\right|_{x=X}(x-X)+\left.\frac{\partial q}{\partial y}\right|_{y=Y}(y-Y)$$

qは平均が $q(X,Y)$

標準偏差 $\sqrt{\left(\left.\frac{\partial q}{\partial x}\right|_{x=X}\right)^2\sigma_x^2+\left(\left.\frac{\partial q}{\partial y}\right|_{y=Y}\right)^2\sigma_y^2}$

の正規分布に従う

誤差が独立ではない場合の誤差伝播

- さらに、正規分布ですらない場合はどうなるか？

$$q=q(x,y)\approx q(\bar{x},\bar{y})+\left.\frac{\partial q}{\partial x}\right|_{x=\bar{x}}(x-\bar{x})+\left.\frac{\partial q}{\partial y}\right|_{y=\bar{y}}(y-\bar{y})$$

qの平均 $\bar{q}=\frac{1}{N}\sum q(x_i,y_i)$

$$=\frac{1}{N}\sum\left[q(\bar{x},\bar{y})+\frac{\partial q}{\partial x}(x_i-\bar{x})+\frac{\partial q}{\partial y}(y_i-\bar{y})\right]$$

$$=\frac{1}{N}\left[\sum q(\bar{x},\bar{y})+\frac{\partial q}{\partial x}\sum(x_i-\bar{x})+\frac{\partial q}{\partial y}\sum(y_i-\bar{y})\right]$$

$$=\underline{q(\bar{x},\bar{y})}$$

← x,yの平均の写像

誤差が独立ではない場合の誤差伝播

$$q=q(x,y)\approx q(\bar{x},\bar{y})+\left.\frac{\partial q}{\partial x}\right|_{x=\bar{x}}(x-\bar{x})+\left.\frac{\partial q}{\partial y}\right|_{y=\bar{y}}(y-\bar{y})$$

qの分散 $\sigma_q^2=\frac{1}{N}\sum[q(x_i,y_i)-\bar{q}]^2$

$$=\frac{1}{N}\sum\left[\frac{\partial q}{\partial x}(x_i-\bar{x})+\frac{\partial q}{\partial y}(y_i-\bar{y})\right]^2$$

$$\boxed{\begin{aligned}&=\underline{\left(\frac{\partial q}{\partial x}\right)^2\frac{1}{N}\sum(x_i-\bar{x})^2+\left(\frac{\partial q}{\partial y}\right)^2\frac{1}{N}\sum(y_i-\bar{y})^2}\\&\quad+2\left(\frac{\partial q}{\partial x}\right)\left(\frac{\partial q}{\partial y}\right)\underline{\frac{1}{N}\sum(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})}\end{aligned}}$$

共分散 (covariance)

- 複数の量の関係を表す量

$$\sigma_{xy}=\frac{1}{N}\sum(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})$$

- 誤差が独立でない（正規分布ですらない）場合の誤差伝播則

$$\sigma_q^2=\left(\frac{\partial q}{\partial x}\right)^2\sigma_x^2+\left(\frac{\partial q}{\partial y}\right)^2\sigma_y^2+\underline{2\left(\frac{\partial q}{\partial x}\right)\left(\frac{\partial q}{\partial y}\right)\sigma_{xy}}$$

独立ならこの項は0となる

共分散と独立

- x,yが独立なら、共分散は0となる

独立なら、同じxに対して、あらゆるyが均等にyの平均のまわりに発生するはず

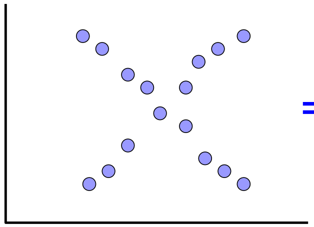
⇒ かけた結果は正負で大きさのおなじものが同じ量だけでるので打ち消してほぼ0となる

(Nが無限に大きいときは厳密に0)

$$\sigma_{xy}=\frac{1}{N}\sum(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})$$

共分散と独立

- もしx,yの共分散が0でなければ
  x,yは**相関を持つ、相関している**という。
- もしx,yの共分散が0ならば
  x,yは独立といえるか？ ⇒ いえない



⇒無相関という

ここでチェック：共分散と誤差伝播

真の値でなく標本平均との残差を用いているので、本当は1/(N-1)

学生：	A	B	C	D	E
角度α：	35	31	33	32	34
角度β：	50	55	51	53	51

$$\bar{\alpha}=33,\quad \bar{\beta}=52$$

$$\sum(\alpha-\bar{\alpha})^2=10,\quad \therefore\sigma_\alpha^2=2.0\quad(1/N)$$

$$\sum(\beta-\bar{\beta})^2=16,\quad \therefore\sigma_\beta^2=3.2\quad(1/N)$$

$$\sum(\alpha-\bar{\alpha})(\beta-\bar{\beta})=-12,\quad \sigma_{\alpha\beta}=-2.4\quad(1/N)$$

$$q_{best}=\bar{\alpha}+\bar{\beta}=85,$$

$$\sigma_q=\sqrt{1\times\sigma_\alpha^2+1\times\sigma_\beta^2+2\sigma_{\alpha\beta}}$$

$$=\sqrt{2.0+3.2-2\times2.4}\approx0.6$$

αとβの平均、標準偏差、共分散をもとめよ。
またq=α+βの誤差を見積もれ

共分散と分散の関係

$$\sigma_x^2 = \frac{1}{N}\sum (x_i - \bar{x})^2, \quad \sigma_y^2 = \frac{1}{N}\sum (y_i - \bar{y})^2,$$

$$\sigma_{xy} = \frac{1}{N}\sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})$$

ここで、

$$\vec{a} = \frac{1}{\sqrt{N}}(x_1 - \bar{x}, \cdots, x_N - \bar{x}), \quad \vec{b} = \frac{1}{\sqrt{N}}(y_1 - \bar{y}, \cdots, y_N - \bar{y})$$

とおくと、 $\sigma_x^2 = |\vec{a}|^2, \quad \sigma_y^2 = |\vec{b}|^2, \quad \sigma_{xy} = (\vec{a}, \vec{b})$

Schwarzの不等式

$$\sigma_x^2 = |\vec{a}|^2, \quad \sigma_y^2 = |\vec{b}|^2, \quad \sigma_{xy} = (\vec{a}, \vec{b})$$

$$\left|\lambda\vec{a} + \vec{b}\right|^2 = (\lambda\vec{a} + \vec{b})(\lambda\vec{a} + \vec{b})$$

$$= \lambda^2 |\vec{a}|^2 + 2\lambda(\vec{a}, \vec{b}) + |\vec{b}|^2 \geq 0$$

λの二次不等式が常に成り立つには判別式Dが負または0

$$D/4 = (\vec{a}, \vec{b})^2 - |a|^2 |b|^2 \leq 0 \quad \underline{\therefore (\vec{a}, \vec{b})^2 \leq |\vec{a}|^2 |\vec{b}|^2}$$

$\boxed{|\sigma_{xy}| < \sigma_x \sigma_y}$ **共分散は標準偏差の積で抑えられる**

相関のある誤差の伝播則

$$\sigma_q^2 = \left(\frac{\partial q}{\partial x}\right)^2 \sigma_x^2 + \left(\frac{\partial q}{\partial y}\right)^2 \sigma_y^2 + 2\frac{\partial q}{\partial x}\frac{\partial q}{\partial y}\sigma_{xy}$$

$$\leq \left(\frac{\partial q}{\partial x}\right)^2 \sigma_x^2 + \left(\frac{\partial q}{\partial y}\right)^2 \sigma_y^2 + 2\left|\frac{\partial q}{\partial x}\frac{\partial q}{\partial y}\right|\sigma_x\sigma_y$$

⇦ Schwarz**の不等式**

$$= \left[\left|\frac{\partial q}{\partial x}\right|\sigma_x + \left|\frac{\partial q}{\partial y}\right|\sigma_y\right]^2$$

$$\therefore \sigma_q \leq \left|\frac{\partial q}{\partial x}\right|\sigma_x + \left|\frac{\partial q}{\partial y}\right|\sigma_y$$

以前の講義の回で述べた誤差の単純和は、誤差の上限をあたえている！

共分散と相関

- **x,yに関係y=A+Bxがあることがわかっていれば、最小二乗法で当てはめができる。**

⇒ 関係があることをデータだけから知ることができるか？

共分散から相関係数を求めることでそれがわかる

相関係数

$$r = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_x \sigma_y} = \frac{\sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum (x_i - \bar{x})^2 \sum (y_i - \bar{y})^2}}$$

Schwarz**の不等式** $|\sigma_{xy}| < \sigma_x \sigma_y$

$$-1 \le r \le 1$$

r= 1: **正の相関**
r=-1: **負の相関**

相関係数

$$r = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_x \sigma_y} = \frac{\sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum (x_i - \bar{x})^2 \sum (y_i - \bar{y})^2}}$$

すべての点が直線にのっているとすると

$y_i = A + Bx_i$ **平均すると** $\bar{y} = A + B\bar{x}$

$$\therefore y_i - \bar{y} = B(x_i - \bar{x})$$

$$\therefore r = \frac{B\sum (x_i - \bar{x})^2}{\sqrt{\sum (x_i - \bar{x})^2 B^2 \sum (x_i - \bar{x})^2}} = \frac{B}{|B|} = \pm 1$$

相関係数rの定量的意味

- **相関係数rが±1にちかいということは定量的にどういう意味があるか？**
  ⇒ 確率として意味づけできる
- **もし無相関なはずの**x,y**を**N**回測定して**r**がある値以上になる確率**$P_N(r>=r_0)$**を求めることができる。**
  ⇒教科書付録C (p.293)
  この確率が十分小さいときはx,y**に相関があるいえる。**
  5%以下なら95%の信頼度で相関は有意であるという。

例：相関係数と線形関係

- **3つの値を測定して相関係数が**0.7**の場合**
  N=3**で**r>=0.7**の確率は**51%**、つまり相関があるとは断言できない。**
  仮に0.9**だとしても確率は**29%**。3点ではなにもいえない。**
- 20**回の測定で相関係数が**0.7**であれば、確率はわずか**0.1%. **したがって、この相関は有意であり、線形関係があると判断できる。**

時系列データの計測

教科書には記述がありません。

時系列の計測

- 温度、位置、速度など、物理量の時間変化
  ⇒ 時刻tと物理量の組み合わせで記録される
  $(0, \theta_0), \ldots, (t, \theta_t)$
- 時刻とともに順番に計測されるデータ
  ⇒ 現在時刻までの履歴データが使える
  ⇒ 得られているすべての計測値をつかって誤差を最小にする推定値を求めることができる

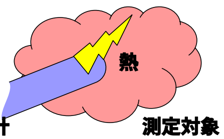
時系列データの推定

1) 過去の計測データの補正(smoothing)
  $(\theta_0, \ldots, \theta_t)$から$\theta_\tau$ $(0 <= \tau <= t)$ の最良推定値を求める

2) 現在の計測データの補正(filtering)
  $(\theta_0, \ldots, \theta_t)$から$\theta_t$ の最良推定値を求める

3) 未来の計測データの予測(prediction)
  $(\theta_0, \ldots, \theta_t)$から$\theta_\tau$ $(\tau > t)$ の最良推定値を求める

温度計の例



- 温度計の原理
  - 測りたい対象の持つ熱が温度計に伝わることで、温度計と対象がほぼ同じ温度になることを利用
  - しかし、熱が伝わるには時間がかかる

⇒ 時系列データをつかった最尤推定を用いると高速に測ることができる
  - 温度上昇の時系列計測値を用いて、将来一定温度になったときの温度を予測する

熱伝導

- **フーリエの法則**
  - 熱が移動する速度は温度差に比例する

$$q_t = k(\theta_\infty - \theta_t)$$

単位時間当りの熱流

測定対象温度

温度計の温度

熱伝導

- **温度計の熱容量をc(J/K)とすると**

$$c\,d\theta_t = q_t dt = k(\theta_\infty - \theta_t)dt$$

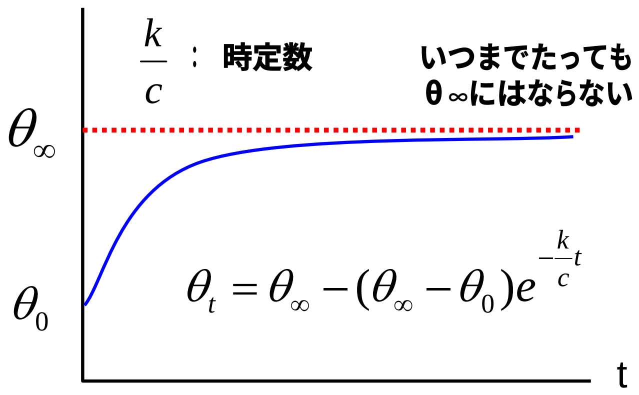
$$\therefore \frac{d\theta_t}{dt} = \frac{k}{c}(\theta_\infty - \theta_t)$$

この微分方程式をとくと

温度計のt=0での初期温度

$$\theta_t = \theta_\infty - (\theta_\infty - \theta_0)e^{-\frac{k}{c}t}$$

1次遅れ系の応答



オフライン推定とオンライン推定

- **オフライン推定**
  - モデル当てはめ（例：直線当てはめ）
  - すべての計測値がそろってから推定する
- **オンライン推定**
  - 時系列で計測値が得られるとき、新しい計測値が得られるたびに逐次的に推定値を更新する
  - その時点での最良推定値がいつも得られるので そのつどなんらかの判断をするのに役立つ

θ∞の逐次的推定

- ここでは簡単のため、θ0,k,c, θtの計測誤差、σθが既知としよう ⇒本当は未知でも推定できる

$$\theta_t = \theta_\infty - (\theta_\infty - \theta_0)e^{-\frac{k}{c}t}$$

$$= \theta_\infty\left(1 - e^{-\frac{k}{c}t}\right) + \theta_0 e^{-\frac{k}{c}t}$$

$$\therefore \theta_\infty = \frac{\theta_t - \theta_0 e^{-\frac{k}{c}t}}{1 - e^{-\frac{k}{c}t}}$$

計測値 $(0,\theta_0),\cdots,(\tau,\theta_\tau),\cdots,(t,\theta_t)$

θ∞ $\left\{\tilde{\theta}_\infty^{(0)},\cdots,\tilde{\theta}_\infty^{(\tau)},\cdots,\tilde{\theta}_\infty^{(t)}\right\}$

θ∞の誤差 $\left\{\sigma^2_{\tilde{\theta}_\infty^{(0)}},\cdots,\sigma^2_{\tilde{\theta}_\infty^{(\tau)}},\cdots,\sigma^2_{\tilde{\theta}_\infty^{(t)}}\right\}$

θ∞の逐次的推定

$$\theta_\infty = \frac{\theta_t - \theta_0 e^{-\frac{k}{c}t}}{1 - e^{-\frac{k}{c}t}}$$

計測値 $(0,\theta_0),\cdots,(\tau,\theta_\tau),\cdots,(t,\theta_t)$

θ∞ $\left\{\tilde{\theta}_\infty^{(0)},\cdots,\tilde{\theta}_\infty^{(\tau)},\cdots,\tilde{\theta}_\infty^{(t)}\right\}$

θ∞の誤差 $\left\{\sigma^2_{\tilde{\theta}_\infty^{(0)}},\cdots,\sigma^2_{\tilde{\theta}_\infty^{(\tau)}},\cdots,\sigma^2_{\tilde{\theta}_\infty^{(t)}}\right\}$

$$\frac{\partial\theta_\infty}{\partial\theta_t} = \frac{1}{1 - e^{-\frac{k}{c}t}}$$ より $$\sigma^2_{\tilde{\theta}_\infty^{(t)}} = \left(\frac{\partial\theta_\infty}{\partial\theta_t}\right)^2 \sigma_\theta^2 = \frac{\sigma_\theta^2}{\left(1 - e^{-\frac{k}{c}t}\right)^2}$$

計測誤差の異なるt個の計測値から最尤推定値を求めるには？

誤差が独立で正規分布するときの誤差伝播則

$$q(x,y) \approx q(X,Y) + \left.\frac{\partial q}{\partial x}\right|_{x=X}(x-X) + \left.\frac{\partial q}{\partial y}\right|_{y=Y}(y-Y)$$

qは平均が $q(X,Y)$

標準偏差 $$\sqrt{\left(\left.\frac{\partial q}{\partial x}\right|_{x=X}\right)^2 \sigma_x^2 + \left(\left.\frac{\partial q}{\partial y}\right|_{y=Y}\right)^2 \sigma_y^2}$$

の正規分布に従う

最小二乗法と加重平均（一般の場合）

（再掲）

計測誤差のことなる複数の計測値

$$x = x_i \pm \sigma_i \qquad i = 1,\cdots,N$$

が得られたとき、xの最尤推定量は最小二乗法により求まり、計測誤差の分散の逆数を重みとした加重平均で与えられる。

$$x_{wav} = \frac{\sum_{i=1}^N w_i x_i}{\sum_{i=1}^N w_i}, \qquad w_i = \frac{1}{\sigma_i^2}$$

θ∞の逐次的推定

$$\sigma^2_{\tilde{\theta}^{(t)}_\infty} = \frac{\sigma^2_\theta}{\left(1-e^{-\frac{k}{c}t}\right)^2}$$ を重みして加重平均をとると

最良推定値

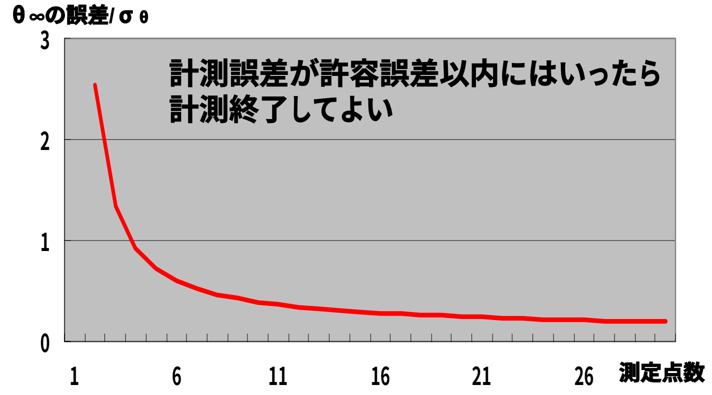
$$\hat{\theta}^{(0:t)}_\infty = \frac{\frac{1}{\sigma^2_\theta}\sum_{\tau=0}^{t}\left\{\left(1-e^{-\frac{k}{c}\tau}\right)^2 \tilde{\theta}^{(\tau)}_\infty\right\}}{\frac{1}{\sigma^2_\theta}\sum_{\tau=0}^{t}\left(1-e^{-\frac{k}{c}\tau}\right)^2} = \frac{\sum_{\tau=0}^{t}\left\{\left(1-e^{-\frac{k}{c}\tau}\right)^2\left(\theta_\tau-\theta_0 e^{-\frac{k}{c}\tau}\right)\right\}}{\sum_{\tau=0}^{t}\left(1-e^{-\frac{k}{c}\tau}\right)^2}$$

$$\sigma^2_{\hat{\theta}^{(0:t)}_\infty} = \frac{\sigma^2_\theta}{\sum_{\tau=0}^{t}\left(1-e^{-\frac{k}{c}\tau}\right)^2} \overset{t>>1}{\approx} \frac{\sigma^2_\theta}{t}$$

最良推定値の推定分散

θ∞の計測誤差

測定点数が増えると急速に計測誤差が減少する



ここでチェック：

- 時刻tでの位置が$x=2t+x_0$で与えられる運動物体がある。ただし、x_0は未知であり、tの計測誤差は0、xの計測誤差は±1とする。このとき、以下の観測データから物体の初期位置x_0を推定せよ。

(t,x) = (1.0, 3.0), (2.0, 6.0), (3.0, 6.0)

t=1での観測x=3から、 $\hat{x}^{(1)}_0 = 3-2\times1 = \underline{1.0},\ \sigma^{2(1)}_{x_0} = \underline{1.0}$

t=2での観測x=6から、 $\hat{x}^{(2)}_0 = 6-2\times2 = 2.0,\ \sigma^{2(2)}_{x_0} = 1.0$

両者を加重平均で統合すると、

$$\hat{x}^{(1:2)}_0 = (1\times1+1\times2)/(1+1) = \underline{1.5},\ \sigma^{2(1:2)}_{x_0} = \underline{0.5}$$

t=3での観測x=6から、同様に$\hat{x}^{(3)}_0 = 6-2\times3 = 0.0,\ \sigma^{2(3)}_{x_0} = 1.0$

$$\hat{x}^{(1:3)}_0 = (1.5/0.5+0.0/1.0)/(1/0.5+1) = \underline{1.0},\ \sigma^{2(1:3)}_{x_0} = \underline{0.3}$$

現在の温度θtの推定

- 現在までの計測値からθ∞が推定できていれば、それをパラメータにして現在の温度θtを推定することができる。

  ⇒ フィルタリング

- θ∞の予測と同じ原理（加重平均）で計算できる

現在の温度θtの推定

- 0〜t-1時刻までの計測値から計算されたθ∞の予測値をもちいて、t時刻の温度計の温度θtを予測

$$\tilde{\theta}_t^{(0:t-1)} = \hat{\theta}_\infty^{(0:t-1)} - (\hat{\theta}_\infty^{(0:t-1)} - \theta_0)e^{-\frac{k}{c}t}$$

この計測誤差の分散は

$$\frac{\partial \tilde{\theta}_t^{(0:t-1)}}{\partial \hat{\theta}_\infty^{(0:t-1)}} = (1-e^{-\frac{k}{c}t}) \quad \text{より} \quad \sigma^2_{\tilde{\theta}_t^{(0:t-1)}} = \sigma^2_{\hat{\theta}_\infty^{(0:t-1)}}(1-e^{-\frac{k}{c}t})^2$$

(誤差伝播則より)

現在の温度θtの推定

t-1時刻までの計測値からの予測とその分散 $\tilde{\theta}_t^{(0:t-1)}$ $\sigma^2_{\tilde{\theta}_t^{(0:t-1)}} = \sigma^2_{\hat{\theta}_\infty^{(0:t-1)}}(1-e^{-\frac{k}{c}t})^2$

t時刻における計測値とその分散 θ_t σ_θ^2

t時刻における温度の最良推定値は？ ⇒加重平均

$$\hat{\theta}_t^{(0:t)} = \frac{(1-e^{-\frac{k}{c}t})\left\{\theta_t + \tilde{\theta}_t^{(0:t-1)}\sum_{\tau=0}^{t-1}(1-e^{-\frac{k}{c}\tau})^2\right\}}{\sum_{\tau=0}^{t}(1-e^{-\frac{k}{c}\tau})^2}, \quad \sigma^2_{\hat{\theta}_t^{(0:t)}} = \frac{\sigma_\theta^2}{\sum_{\tau=0}^{t}(1-e^{-\frac{k}{c}\tau})^2}$$

時系列データの計測(2)

教科書には記述がありません。

時系列の計測

- 温度、位置、速度など、物理量の時間変化
  ⇒ 時刻tと物理量の組み合わせで記録される
  (0, θ0),….,(t, θt)
- 時刻とともに順番に計測されるデータ
  ⇒ 現在時刻までの履歴データが使える
  ⇒ 得られているすべての計測値をつかって誤差を最小にする推定値を求めることができる

逐次法によるオンライン推定

- 加重平均の考えと使うと、**過去すべての計測値を記録していなくても現時刻の最良推定値を計算できる**

⇒ 直前の時刻の推定値から、モデル（温度計の場合はフーリエの法則）から現時刻の値とその分散を予測し、実際の観測と計測誤差分散を加重平均により統合して、現時刻の値を推定する

⇒自動的に、過去すべての計測値を適切に考慮したことになる

熱伝導

- 温度計の熱容量をc(J/K)とすると

$$c\,d\theta_t = q_t dt = k(\theta_\infty - \theta_t)dt$$

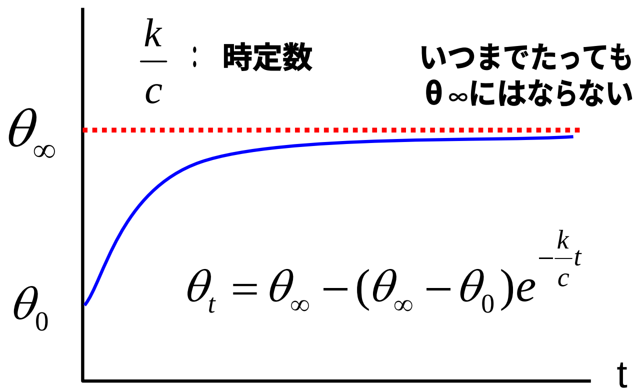
$$\therefore \frac{d\theta_t}{dt} = \frac{k}{c}(\theta_\infty - \theta_t)$$

この微分方程式をとくと

温度計のt=0での初期温度

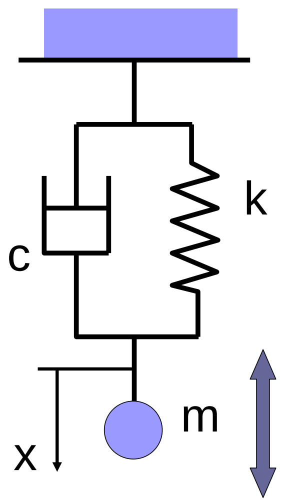
$$\theta_t = \theta_\infty - (\theta_\infty - \theta_0)e^{-\frac{k}{c}t}$$

1次遅れ系の応答



ばねばかりの例

- 重さを測りたいものをぶら下げて、ばねの伸びを測ると重さがわかる
- 振動が収まってから測る必要がある。
- 振動の周期をはかることでも重さがわかる。

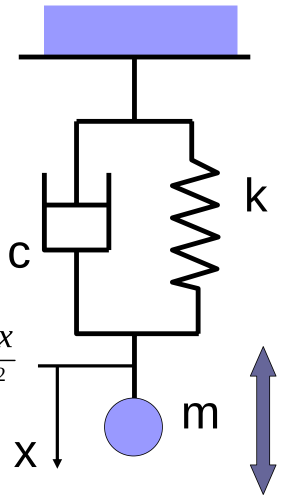


ばねばかりの例

- ばね定数 k （既知）
  変位に比例した力
- ダンパー定数 c（既知）
  速度に比例した力
- 重さ m （未知）
  加速度に比例した力

力のつりあい式 $\dot{x} \equiv \dfrac{dx}{dt}, \ddot{x} \equiv \dfrac{d^2x}{dt^2}$

$$m\ddot{x} + c\dot{x} + kx = mg$$



2階常微分方程式 （2次遅れ系）

$\ddot{x} + a\dot{x} + b = c$ の解は

$s^2 + as + b = 0$ の解をα、βとすると

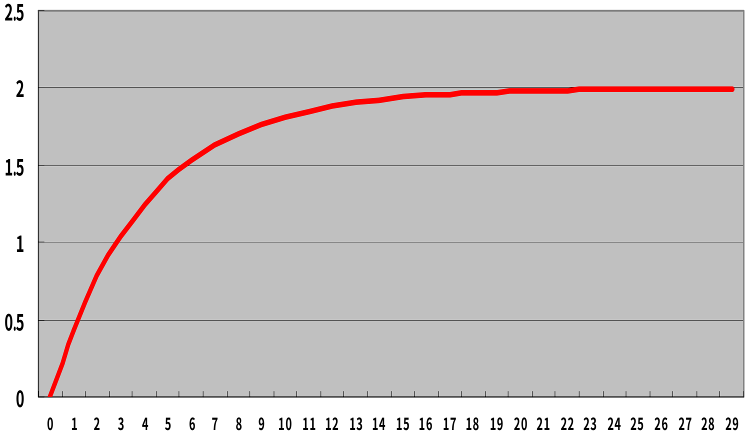
二実数解の場合 $x(t) = c_1 e^{-\alpha t} + c_2 e^{-\beta t} + c$

重解の場合 $x(t) = (c_1 + c_2 t)e^{-\alpha t} + c$

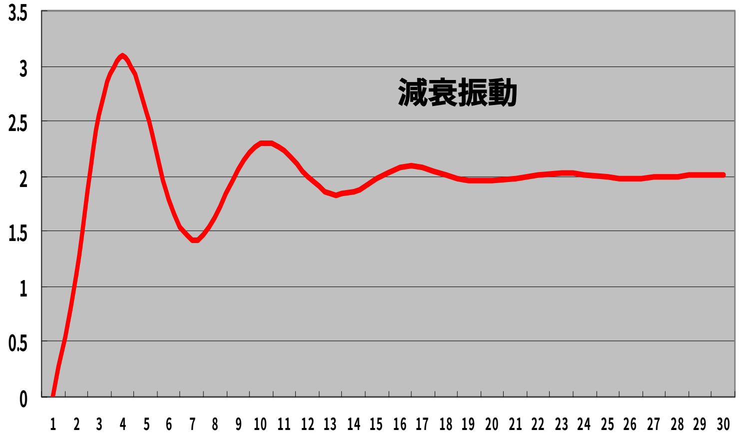
二虚数解の場合 $\alpha = \lambda + \omega i, \beta = \lambda - \omega i$

$$x(t) = e^{-\lambda t}(c_1 \cos \omega t + c_2 \sin \omega t) + c$$

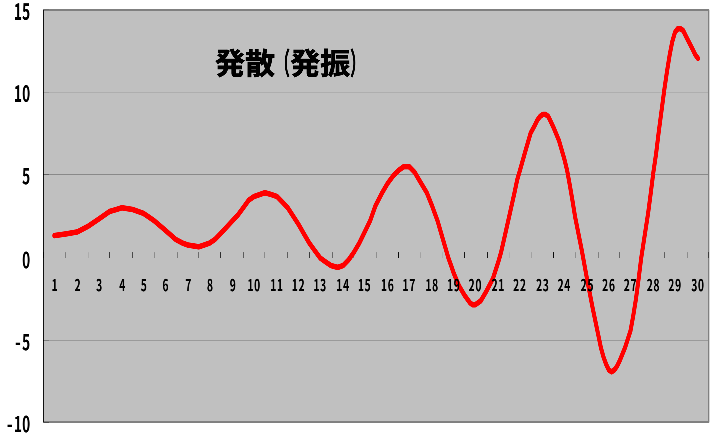
2実数解の場合



2虚数解の場合



2虚数解の場合



ばねばかりの例

$$m\ddot{x}+c\dot{x}+kx=mg$$

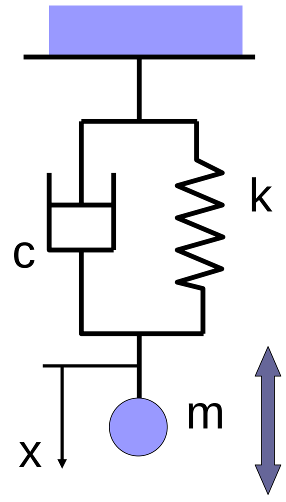
$$s=-\frac{c}{2m}\pm\sqrt{\frac{k}{m}-\frac{c^2}{4m^2}}i$$

負なので減衰

$m>\frac{c^2}{4k}$ のとき

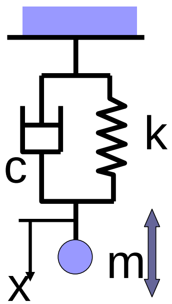
周期振動

角周波数 $\omega=\sqrt{\frac{k}{m}-\frac{c^2}{4m^2}}$



ばねばかりの例

$$m\ddot{x}+c\dot{x}+kx=mg$$



$$x(t)=\frac{mg}{k}-e^{-\frac{c}{2m}t}\left(\frac{mg}{k}\cos\omega t+\frac{cg}{2k\omega}\sin\omega t\right)$$

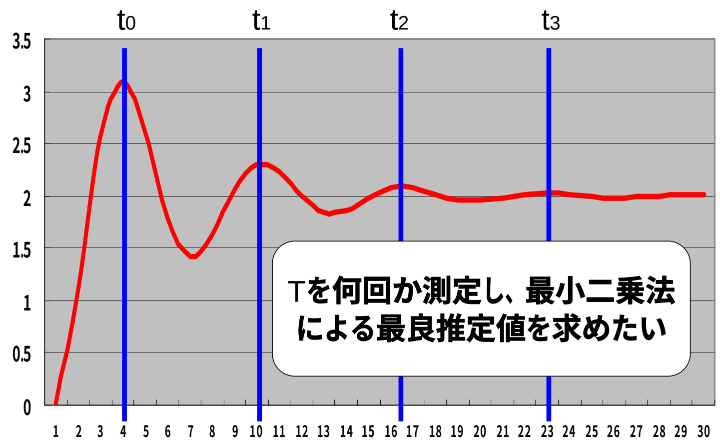
t⇒∞で $x=\frac{mg}{k}$ に近づく（つりあいの位置）

待てないときはどうするか？

振動周期 $T=\frac{2\pi}{\omega}=\frac{4\pi m}{\sqrt{4mk-c^2}}$ をはかる

周期Tの計測

$T_1=t_1-t_0$　$T_2=t_2-t_1$　$T_3=t_3-t_2$



相関のある計測値の統合

- 同一の対象を何度か測定した場合、誤差が独立ならば、平均もしくは加重平均で最良推定値が求まる
- しかし、$T_1, T_2, \ldots T_n$は相関をもつ！

$T_1=t_1-t_0$　　　$t_0, t_1, t_2, \ldots$..は独立

$T_2=t_2-t_1$　　　となりあうTは同じ計測値tをつかって計算されるので、相関をもってしまう。

$T_3=t_3-t_2$

共分散 (covariance)

再掲

- 複数の量の関係を表す量

$$\sigma_{xy} = \frac{1}{N}\sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})$$

- 誤差が独立でない（正規分布ですらない）場合の誤差伝播則

$$\sigma_q^2 = \left(\frac{\partial q}{\partial x}\right)^2 \sigma_x^2 + \left(\frac{\partial q}{\partial y}\right)^2 \sigma_y^2 + \underline{2\left(\frac{\partial q}{\partial x}\right)\left(\frac{\partial q}{\partial y}\right)\sigma_{xy}}$$

独立ならこの項は0となる

相関のある計測値の統合

- T_iとT_{i+1}の共分散を求めてみる

$$T_i = t_i - t_{i-1},\quad \sigma_{T_i}^2 = \left(\frac{\partial T_i}{\partial t_i}\right)^2 \sigma_t^2 + \left(\frac{\partial T_i}{\partial t_{i-1}}\right)^2 \sigma_t^2 = \underline{2\sigma_t^2}$$

Tの分散

$$\sigma_{T_i,T_{i+1}} = \frac{1}{N}\sum (\delta t_i - \delta t_{i-1})(\delta t_{i+1} - \delta t_i)$$

$$= \frac{1}{N}\sum (\delta t_i \delta t_{i+1} - \delta t_i{}^2 - \delta t_{i-1}\delta t_{i+1} + \delta t_{i-1}\delta t_i)$$

$$= -\frac{1}{N}\sum \delta t_i{}^2 = \underline{-\sigma_t^2}$$

T_i, T_{i+1}の共分散

共分散が負⇒T_iがへるとT_{i+1}が増える

相関のある計測値の統合

- 2つの計測値　$(x_1, \sigma_1), (x_2, \sigma_2), \sigma_{12}$

線形推定　$\hat{x} = Ax_1 + Bx_2 + C$

A,B,Cを決める ⇒ 不偏推定かつ最小分散推定になるように

$$\hat{x}^{(1)} = Ax_1{}^{(1)} + Bx_2{}^{(1)} + C \qquad \therefore \sum \hat{x}^{(i)} = A\sum x_1{}^{(i)} + B\sum x_2{}^{(i)} + C$$

$$\hat{x}^{(2)} = Ax_1{}^{(2)} + Bx_2{}^{(2)} + C \qquad (N \to \infty) \Rightarrow x = Ax + Bx + C$$

$$\vdots \qquad \therefore A + B = 1,\ C = 0$$

$$\hat{x}^{(N)} = Ax_1{}^{(N)} + Bx_2{}^{(N)} + C \qquad \hat{x} = Ax_1 + (1-A)x_2$$

相関のある計測値の統合

- 2つの計測値　$(x_1,\sigma_1),(x_2,\sigma_2),\sigma_{12}$

$$\hat{x} = Ax_1 + (1-A)x_2$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{\hat{x}}^2 &= \frac{1}{N}\sum(\hat{x}-x)^2 = \frac{1}{N}\sum(Ax_1+(1-A)x_2-x)^2 \\
&= \frac{1}{N}\sum\{A(x_1-x)+(1-A)(x_2-x)\}^2 \\
&= A^2\frac{1}{N}\sum(x_1-x)^2 + (1-A)^2\frac{1}{N}\sum(x_2-x)^2 \\
&\quad + 2A(1-A)\frac{1}{N}\sum(x_1-x)(x_2-x) \\
&= A^2\sigma_1^2 + (1-A)^2\sigma_2^2 + 2A(1-A)\sigma_{12} \Rightarrow \min
\end{aligned}$$

最小二乗法
（最小分散推定）

$$\frac{\partial\sigma_{\hat{x}}^2}{\partial A} = 2A\sigma_1^2 - 2(1-A)\sigma_2^2 + 2(1-2A)\sigma_{12} = 0$$

相関のある計測値の統合

- 2つの相関を持つ計測値 $(x_1,\sigma_1),(x_2,\sigma_2),\sigma_{12}$ から最小二乗法による最尤推定値は，以下の重みによる加重平均によってもとまる

$$w_1 = \frac{1}{\sigma_1^2} - \frac{\sigma_{12}}{\underline{\sigma_1^2\sigma_2^2}},\quad w_2 = \frac{1}{\sigma_2^2} - \frac{\sigma_{12}}{\underline{\sigma_1^2\sigma_2^2}}$$

$$\hat{x} = \frac{(\sigma_2^2-\sigma_{12})x_1 + (\sigma_1^2-\sigma_{12})x_2}{\sigma_1^2+\sigma_2^2-2\sigma_{12}} = \frac{w_1x_1+w_2x_2}{w_1+w_2}$$

$$\sigma_{\hat{x}}^2 = \frac{1-r^2}{w_1+w_2} = \frac{\sigma_1^2\sigma_2^2-\sigma_{12}^2}{\sigma_1^2+\sigma_2^2-2\sigma_{12}} \quad \left(r = \frac{\sigma_{12}}{\sigma_1\sigma_2}\right)$$ ←相関

周期Tの計測値の統合

測定値の分散と共分散 $(T_1,2\sigma_T^2),\quad (T_2,2\sigma_T^2),\quad \sigma_{T_1,T_2} = -\sigma_T^2$

$$\hat{T}^{(1:2)} = \frac{(2\sigma_T^2+\sigma_T^2)T_1 + (2\sigma_T^2+\sigma_T^2)T_2}{2\sigma_T^2+2\sigma_T^2+2\sigma_T^2} = \underline{\frac{T_1+T_2}{2}},\quad \sigma_{\hat{T}^{(1:2)}}^2 = \frac{2\sigma_T^2\cdot 2\sigma_T^2-\sigma_T^4}{2\sigma_T^2+2\sigma_T^2+2\sigma_T^2} = \underline{\frac{\sigma_T^2}{2}}$$

$$\sigma_{\hat{T}^{(1:2)},T_3} = \frac{1}{N}\sum\frac{\delta T_1+\delta T_2}{2}\cdot\delta T_3 = \frac{1}{2N}\sum\delta T_2\delta T_3 = -\frac{\sigma_T^2}{2}$$

$$\hat{T}^{(1:3)} = \frac{(2\sigma_T^2+\frac{\sigma_T^2}{2})\hat{T}^{(1:2)} + (\frac{\sigma_T^2}{2}+\frac{\sigma_T^2}{2})T_3}{\frac{\sigma_T^2}{2}+\frac{\sigma_T^2}{2}+\sigma_T^2} = \frac{\frac{5}{2}\hat{T}^{(1:2)}+T_3}{\frac{7}{2}} = \underline{\frac{5\hat{T}^{(1:2)}+2T_3}{7}}$$

$$\sigma_{\hat{T}^{(1:3)}}^2 = \frac{\frac{\sigma_T^2}{2}\cdot 2\sigma_T^2 - \left(\frac{\sigma_T^2}{2}\right)^2}{\frac{\sigma_T^2}{2}+2\sigma_T^2+\sigma_T^2} = \frac{\frac{3}{4}\sigma_T^2}{\frac{7}{2}} = \underline{\frac{3}{14}}\sigma_T^2$$

計測値がふえるごとに
推定分散が減少する

チェック：相関を考慮した推定

- 同一量を計測した2つの計測値から真の値を推定したい。2つの計測誤差には相関がある場合、相関を無視する（独立と仮定する）と推定値および推定誤差は正しい値に比べてどのようになるか？

$$x_1 = 1.0,\quad \sigma_1^2 = 2.0,\quad x_2 = 2.0,\quad \sigma_2^2 = 1.0,\quad \sigma_{12} = -0.5$$

相関考慮

$$\hat{x} = \frac{(\sigma_2^2-\sigma_{12})x_1+(\sigma_1^2-\sigma_{12})x_2}{\sigma_1^2+\sigma_2^2-2\sigma_{12}} = \frac{(1+0.5)\times1+(2+0.5)\times2}{1+2+2\times0.5} = \underline{1.4}$$

$$\sigma_{\hat{x}}^2 = \frac{\sigma_1^2\sigma_2^2-\sigma_{12}^2}{\sigma_1^2+\sigma_2^2-2\sigma_{12}} = \frac{1\times2-0.5^2}{1+2+2\times0.5} = \underline{0.4}$$

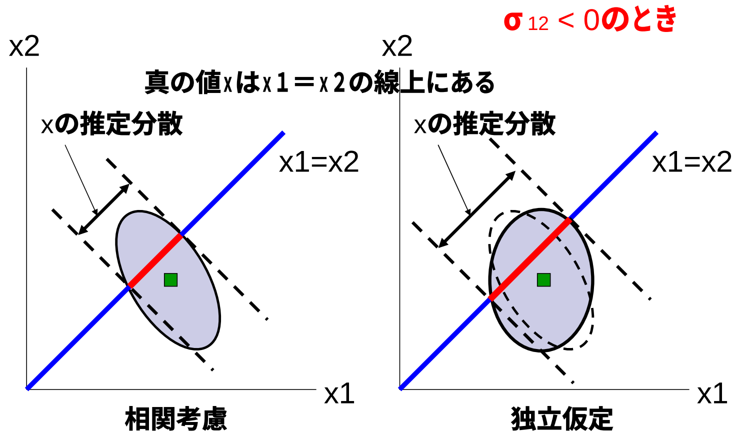
独立仮定

$$\hat{x} = \frac{x_1/\sigma_1^2+x_2/\sigma_2^2}{1/\sigma_1^2+1/\sigma_2^2} = \frac{1/2\times1+1/1\times2}{1/2+1/1} = \underline{1.7}$$

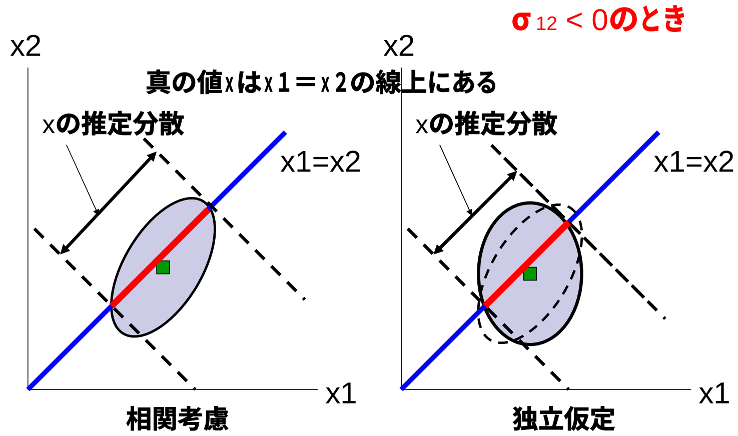
$$\sigma_{\hat{x}}^2 = \frac{1}{1/\sigma_1^2+1/\sigma_2^2} = \frac{1}{1/2+1/1} = \underline{0.7}$$

過大評価

相関を無視するとなぜ過大評価となるのか



過小評価になることもある！！



これまでのまとめ

- 絶対誤差、相対誤差、ランダム誤差と系統誤差
- 誤差伝播則、単純和（上限値）、二乗和（ランダムで独立な場合）
- 平均値と標準偏差、不偏分散
- 正規分布、最尤推定、最小二乗法、最尤推定の誤差
- 加重平均、線形回帰（直線当てはめ）
- 共分散、相関係数
- 時系列からの推定