Table of Contents

非線形最小2乗法

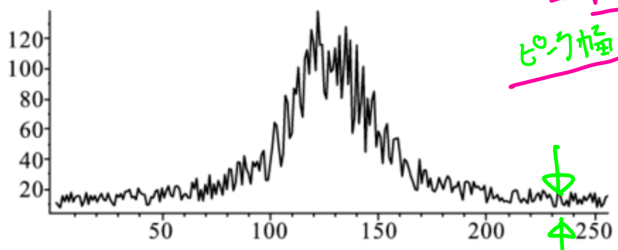
(NonLinearFit)

file:/Users/bob/Github/TeamNishitani/jupyter_num_calc/nonlinearfit
https://github.com/daddygongon/jupyter_num_calc/tree/master/notebooks_p

cc by Shigeto R. Nishitani 2017-8

非線形最小2乗法の原理

前章では，データに近似的にフィットする最小二乗法を紹介した．ここでは，フィット式が多項式のような線形関係にない関数の最小二乗法を紹介する．図のようなデータにフィットする場合を考えよう．



C9_NonLinearFitplot2d1.png

このデータにあてはめるのはローレンツ関数,

$$F(x;\mathbf{a}) = a_1 + \frac{a_2}{a_3 + (x - a_4)^2}$$

Lorentzian

$a = \{a_1, a_2, a_3, a_4\}$

$a_3 = a_2^2$

である．この関数の特徴は，今まで見てきた関数と違いパラメータが線形関係になっていない．誤差関数は，いままでと同様に

$$\chi^2(\mathbf{a}) = \sum_i^N d_i^2 = \sum_i^N \left(F(x_i;\mathbf{a}) - y_i\right)^2$$

で，$\mathbf{a} = \{a_0, a_1, ..\}$をパラメータとして変えた時に最小となる値を求める点もかわらない．しかし，線形の最小二乗法のように微分しても一元の方程式にならず，連立方程式を単に解くだけでは求まらない．

そこで図のような2次関数の最小値を求める場合を考える．最小値の点a_0のまわりで，Taylor展開すると，$\mathbf{d}, \mathbf{D}$をそれぞれの係数とすると，

$$\chi^2(\mathbf{a}) = \chi^2(\mathbf{a}_0) - \mathbf{d}(\mathbf{a} - \mathbf{a}_0) + \frac{1}{2}\mathbf{D}(\mathbf{a} - \mathbf{a}_0)^2$$

である．最小の点a_0は，微分が0になるので，

$$\mathbf{a}_0 = \mathbf{a} + \mathbf{D}^{-1} \times (-\mathbf{d})$$

と予測される．

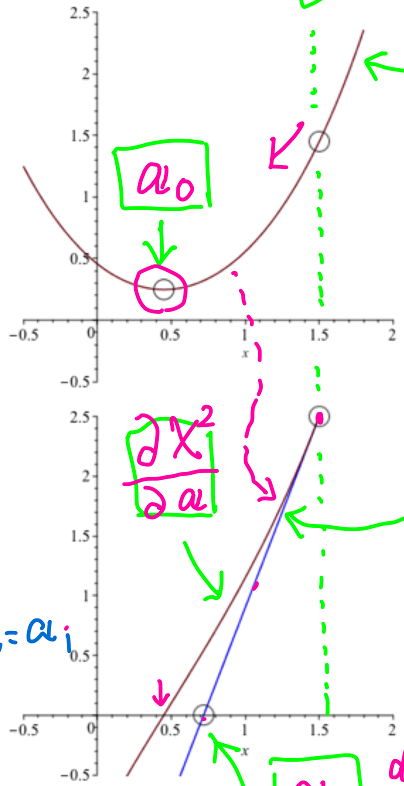
図を参照して上の式を導け．またその意味を考察せよ．

$-d + D(a - a_0) = \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial \chi^2}{\partial a}$

$D(a - a_0) = d$

$a - a_0 = \frac{d}{D}$

$a_0 = a - \frac{d}{D}$



non_linear_fit_graph

カイ χ

勾配法 Gradient Method

bf bold face 太字

a, a_0, a_1, $\chi^2(a)$, $\frac{\partial \chi^2}{\partial a}$, $\left.\frac{\partial \chi^2}{\partial a}\right|_{a=a_i}$, $a - \frac{d}{D}$