計測工学
（長谷川担当）
3

長谷川秀一

2021年4月21日

前回講義：フィッティング

- $\sigma\left(h(x_j)\right)^2$がわからないが、ポアソン分布であることから
- $\sigma\left(h(x_j)\right) = \sqrt{NP(x_j)} \approx \sqrt{h(x_j)}$と置くことができて
- $\chi^2 = \sum_{j=1}^{n} \frac{\left[h(x_j) - NP(x_j)\right]^2}{NP(x_j)} \approx \sum_{j=1}^{n} \frac{\left[h(x_j) - NP(x_j)\right]^2}{h(x_j)}$
- $\chi^2 \approx n$となればよい一致
- ２つが完全に一致すれば0となるが、これは確率としては低いはず
- 正確には　$\langle \chi^2 \rangle = \nu = n - n_c$　ν: 自由度数、n_c：束縛条件数
- 規格化すると$\chi_\nu^2 = \frac{\chi^2}{\nu}$

前回講義コメント：束縛条件と自由度

例えば、線形関数の場合

- 測定値：x_j　頻度：h_j　モデル：$y_j(x_j) = a + bx_j$

a, bを求めるためには最低2点が必要=> $n_c = 2$

これより、χ²検定をするためには最低3点が必要。

つまり

- $\chi^2 = \left(\frac{h_3-(a+bx_3)}{\sigma_3}\right)^2$　自由度＝3－2＝1

実際の統計処理の場合は、ある測定値だけ特別に扱うということはない。

線形関数のフィッティング（前回）

- $y(x) = a + bx$
- これに対するχ^2は
- $\chi^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{y_i - a - bx_i}{\sigma_i} \right)^2$
- これをパラメータa, bに対して最小化するためには、それぞれで微分してゼロとなるようにすればよい。

- $a = \frac{1}{\Delta} \begin{vmatrix} \Sigma \frac{y_i}{\sigma_i^2} & \Sigma \frac{x_i}{\sigma_i^2} \\ \Sigma \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2} & \Sigma \frac{x_i^2}{\sigma_i^2} \end{vmatrix}, \quad b = \frac{1}{\Delta} \begin{vmatrix} \Sigma \frac{1}{\sigma_i^2} & \Sigma \frac{y_i}{\sigma_i^2} \\ \Sigma \frac{x_i}{\sigma_i^2} & \Sigma \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2} \end{vmatrix}, \quad \Delta = \begin{vmatrix} \Sigma \frac{1}{\sigma_i^2} & \Sigma \frac{x_i}{\sigma_i^2} \\ \Sigma \frac{x_i}{\sigma_i^2} & \Sigma \frac{x_i^2}{\sigma_i^2} \end{vmatrix}$
- $\sigma^2 \approx s^2 = \frac{1}{N-2} \Sigma (y_i - \bar{y})^2$
- 例えば計数値の場合、$\sigma_i^2 \approx y_i$
- パラメータa, bの不確かさは、誤差伝播の式から
- $\sigma_a^2 \approx \frac{1}{\Delta} \Sigma \frac{x_i^2}{\sigma_i^2}, \quad \sigma_b^2 \approx \frac{1}{\Delta} \Sigma \frac{1}{\sigma_i^2}$

任意の関数（非線形）に対するフィッティング

- 最尤法:以下の確率を最大化する
- $P(a_1, a_2, \cdots, a_m) =$

$$\prod\left(\frac{1}{\sigma_i\sqrt{2\pi}}\right)\exp\left\{-\frac{1}{2}\sum\left(\frac{y_i - y(x_i)}{\sigma_i}\right)^2\right\}$$

- つまり、以下を最小化する
- $\chi^2 = \sum\left(\frac{y_i - y(x_i)}{\sigma_i}\right)^2$
- 求めたいパラメータに対して微分を取り、それをゼロとすればよい
- $\frac{\partial\chi^2}{\partial a_j} = \frac{\partial}{\partial a_j}\sum\left(\frac{y_i - y(x_i)}{\sigma_i}\right)^2 = 0$
- $= -2\sum\frac{1}{\sigma_i^2}[y_i - y(x_i)]\frac{\partial y(x_i)}{\partial a_j}$

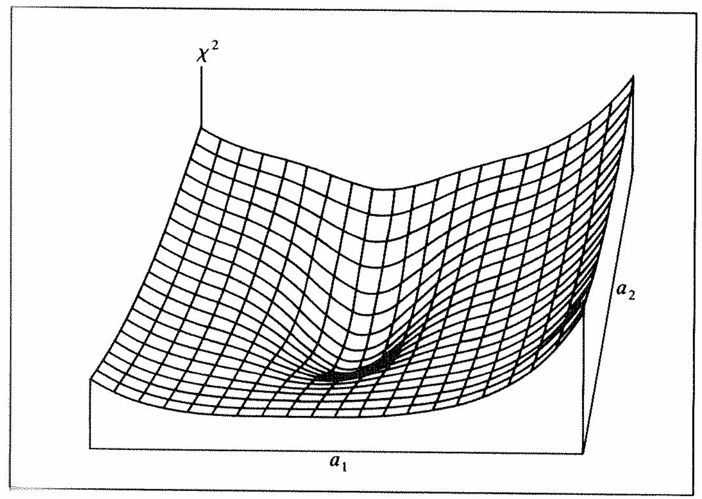

FIGURE 8.2
Chi-square hypersurface as a function of two parameters.

最小値近辺でのふるまい

- χ^2を求めるべきa_j^0の周りでTaylor展開すると

$$\chi^2 = \sum \left(\frac{y_i - y(x_i)}{\sigma_i} \right)^2$$

$$\approx \chi_0^2 + \sum_{j=1}^{m} \left\{ \overset{=0}{\frac{\partial \chi_0^2}{\partial a_j}} (a_j - a_j^0) \right\} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \left\{ \frac{\partial^2 \chi_0^2}{\partial a_k \partial a_j} (a_k - a_k^0)(a_j - a_j^0) \right\}$$

- 解の近辺ではパラメータの2次式になる

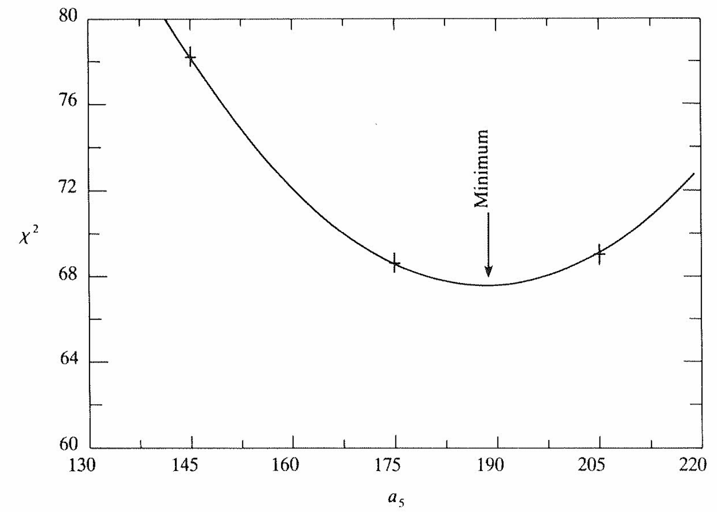

FIGURE 8.3
Plot of χ^2 versus a single parameter a in the region of a local minimum. The location of the minimum is calculated by fitting a parabola through the three indicated data points.

パラメータを求める

パラメータ探索にあたって

1. 初期値を決める
2. ある範囲に限定する
3. 探索のステップを決める
4. 収束条件を決める

非線形関数でのフィッティング法

1. Grid search method
2. Gradient search method
3. Expansion method
4. Marquardt method
5. (Monte Carlo method)

Grid search method

χ2がaj以外のパラメータに大きく依存しない場合、最適値ajを、各ajに対してχ2を最小化すること求める手法

1. 初期値ajと刻みΔajを決めてχ2を計算する
2. １つのajを±Δajだけ動かしてχ2を計算する
3. χ2の減少から増加に転じるまで２を繰り返す
4. 他のajを順次計算する
5. χ2の減少分がほとんどなくなるまで繰り返す

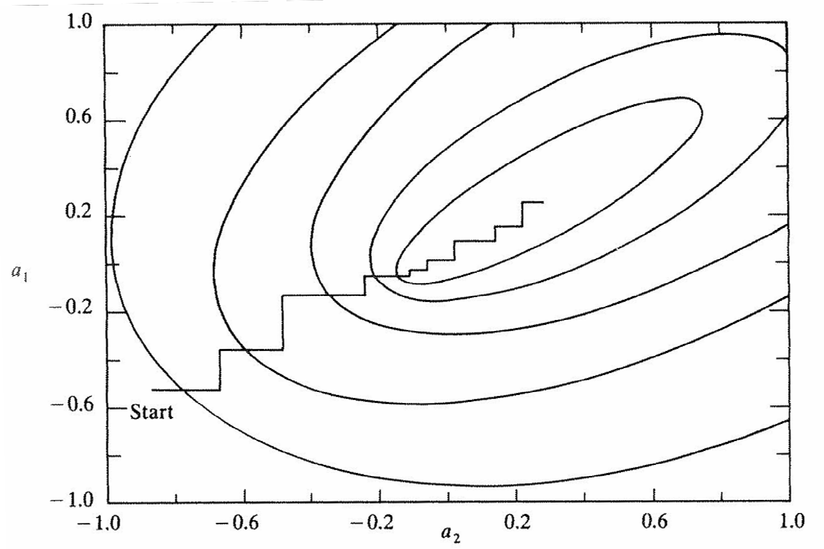

FIGURE 8.4
Contour plot of χ^2 as a function of two highly correlated variables. The zigzag line represents the search path approach to a local minimum by the grid-search method.

Gradient search method

最小に向かって、すべてのajを同時に変化させる方法

- 傾きは

$$\nabla\chi^2 = \sum_{j=1}^{n}\left[\frac{\partial\chi^2}{\partial a_j}\ \widehat{a_j}\right]$$

ただし$\widehat{a_j}$は単位ベクトル

数値的には

$$(\nabla\chi^2)_j = \frac{\partial\chi^2}{\partial a_j} \cong \frac{\chi^2(a_j + f\Delta a_j) - \chi^2(a_j)}{f\Delta a_j}$$

Gradient search method2

ここで無次元パラメータbjを以下のように定義する

$b_j = \frac{a_j}{\Delta a_j}$とすると$\frac{\partial \chi^2}{\partial b_j} = \frac{\partial \chi^2}{\partial b_j}\Delta a_j \cong \frac{\chi^2(a_j+f\Delta a_j)-\chi^2(a_j)}{f\Delta a_j}\Delta a_j$

$$= \frac{\chi^2\left(a_j + f\Delta a_j\right) - \chi^2\left(a_j\right)}{f}$$

これから無次元の傾きγを定義する

- $\gamma_j = \frac{(\partial \chi^2)/(\partial b_j)}{\sqrt{\sum_{j=1}^{m}\left((\partial \chi^2)/(\partial b_j)\right)^2}}$
- γが最急降下方向に対応する。
- 探索はΔajを同時に繰り上げていくことで行う。方向としては
- $\delta a_j = -\gamma_j \Delta a_j$

Expansion method

- $\chi^2 \approx \chi_0^2 + \sum_{j=1}^{m} \left\{ \frac{\partial \chi_0^2}{\partial a_j} \delta a_j \right\} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \left\{ \frac{\partial^2 \chi_0^2}{\partial a_k \partial a_j} \delta a_k \delta a_j \right\}$

ここで

$\chi_0^2 = \sum \left\{ \frac{1}{\sigma_i^2} [y_i - y^0(x_i)]^2 \right\}$, $y^0(x_i)$は$\delta a_j = 0$のときの値

$\delta a_j = a_j - a_j^0$

これに最小2乗法を適用すると、パラメータの変化分δaj
に対してχ2を最小化することになる

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial(\delta a_k)} = \frac{\partial \chi_0^2}{\partial a_k} + \sum_{j=1}^{m} \left\{ \frac{\partial^2 \chi_0^2}{\partial a_k \partial a_j} \delta a_j \right\} = 0, \qquad \mathrm{k} = 1, \mathrm{m}$$

Expansion method2

- 書き換えると
- $\beta_k - \sum_{j=1}^{m}\left\{\delta a_j \alpha_{jk}\right\} = 0, \quad \mathrm{k} = 1, \mathrm{m}$ 行列で書くと $\boldsymbol{\upbeta} = \boldsymbol{\delta a}\ \boldsymbol{\alpha}$
- ただし、$\beta_k = -\frac{1}{2}\frac{\partial \chi_0^2}{\partial a_k}$, $\alpha_{jk} = \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \chi_0^2}{\partial a_j \partial a_k}$
- 解は以下のように求めることができる
- $\boldsymbol{\delta a} = \boldsymbol{\upbeta}\ \boldsymbol{\upalpha}^{-1}$

Marquardt method

- Gradient（近傍で収束が悪い）とExpansion（近傍に近づくのに時間がかかる）を組み合わせた手法
- $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\delta a}\,\boldsymbol{\alpha}'$　ただし$\alpha'_{jk} = \begin{cases} \alpha_{jk}(1+\lambda) & j = k \\ \alpha_{jk} & j \neq k \end{cases}$
- λが小さいときはExpansion法と同じ
- λが大きいときは対角項が支配的になり$\beta_j \cong \lambda\delta a_j\,\alpha_{jj}$
- 従って変化分δa_jは以下のように求めることができる
- $\delta a_j = \sum_{k=1}^{m}\left(\beta_k \alpha'^{-1}_{jk}\right)$

1. χ2(a)を計算する
2. λ=0.001で開始する
3. δaとχ2(a+δa)をこのλで計算する
4. χ2(a+δa)＞χ2(a）のとき、λを１０倍にして３を繰り返す
5. χ2(a+δa)<χ2(a）のとき、λを1/１０にして、a’=a+δaを出発地点として３を繰り返す

課題　（数値はエクセルファイル参照）

1. 2つ以上（多い方がよい。取り上げた4項目に限らない。）の手法を用いて、1つ、2つのピークを仮定してフィッティングをせよ。
2. 1で得られた結果について議論せよ。

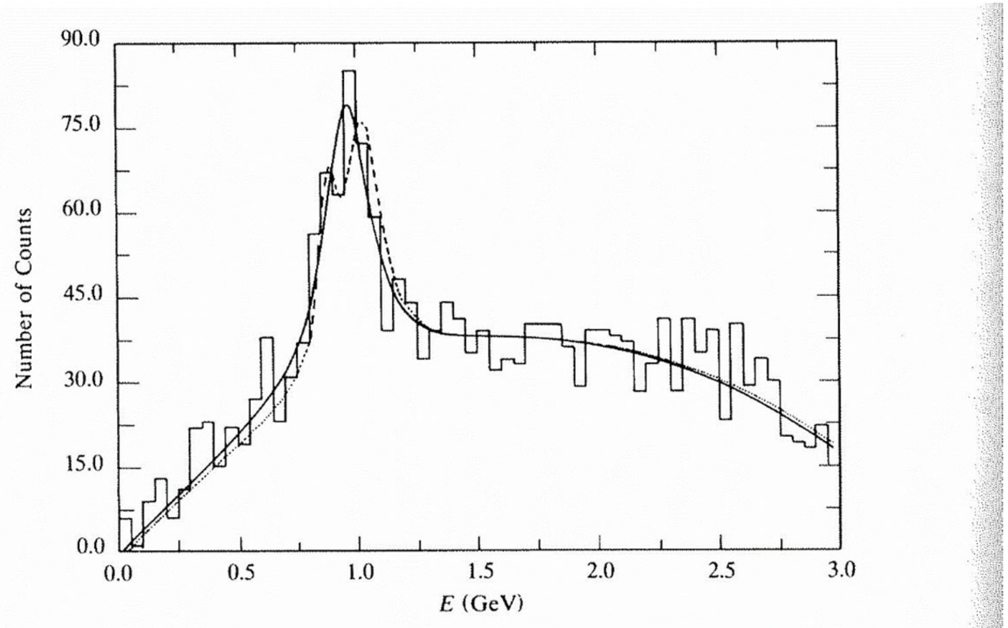

FIGURE 9.2
A histogram of 2000 simulated events corresponding to two Lorentzian peaks on a second-degree polynomial background. The solid curve corresponds to a fit to the data of a single peak plus background terms. The dashed curve is the result of a fit to the parameters of the smaller peak with