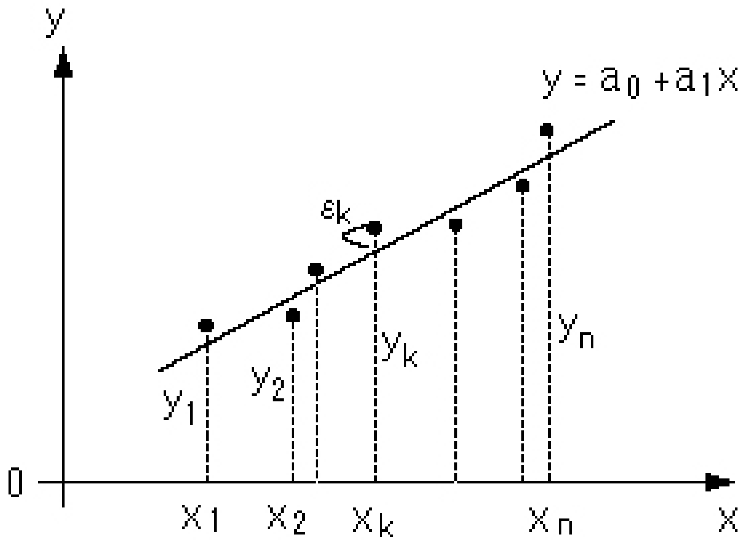
電子計測　第9回目　講義資料

杉本　泰博

データ処理 (最小二乗法)

最小二乗法とは、その曲線とデータポイントとの間に生じる適合の誤差を最小にするような一つの曲線を計算する方法。

例えば、n個一組のデータポイント (xi,yi) があって、それらを通して1本の直線を引きたい場合 (下図) に、



データに最も適合した (Best Fit) 直線の係数a0 , a1 の最確値を決定する方法である。

計算式の導出その１

データ数をN, 未知量の数をnとする。N≧nでなければならない。

いま、ある電気回路の周波数応答特性あるいは時間応答特性を測定し、測定データから回路パラメータを決定する場合を考える。回路形式はあらかじめわかっており、回路パラメータと応答との関係が次式であらわせるとする。

$$A = f(x_1, x_2, \cdots, x_n, y) \qquad （８－１）$$

A:応答
x1～xn：回路パラメータの値
y：周波数または時間

$y = y_i (i = 1 \sim N)$におけるAの値を測定し、N個のデータ$M_i (i = 1 \sim N)$が得られた、とする。$x_k (k = 1 \sim n)$の１次近似値（初期値）を$x_k^{(1)}$として、Aの１次近似値$A_i^{(1)}$を（８－１）式より計算。

$$A_i^{(1)} = f\left(x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \cdots, x_n^{(1)}, y_i\right) \quad (i = 1 \sim N) \qquad （８－２）$$

$\delta A_i^{(1)} = M_i - A_i^{(1)}$とする。$\delta A_i^{(1)} << A_i^{(1)}$であれば、$\delta A_i^{(1)}$はAを$x_k$でテイラー展開した時の１次近似式より、

$$\delta A_i^{(1)} \cong \sum_{k=1}^{n} \left[\frac{\partial A}{\partial x_k}\right]_i^{(1)} \delta x_k \quad \text{と求まる。}$$

計算式の導出その2

注：Taylorの定理

$$f(x_k) = f\left(x_k^{(1)}\right) + \underbrace{\left(x_k - x_k^{(1)}\right)}_{\delta x_k} \underbrace{f'\left(x_k^{(1)}\right)}_{\left[\frac{\partial A}{\partial x_k}\right]_i^{(1)} = \left[\frac{\partial A}{\partial x_k}\right]_{x=x_k^{(1)},\, y=y_i}} + \frac{\left(x_k - x_k^{(1)}\right)^2}{2!} f''\left(x_k^{(1)}\right) + \cdots\cdots$$

両辺の差の二乗和S

$$S = \sum_{i=1}^{N} \left[\delta A_i^{(1)} - \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial A}{\partial x_k} \delta x_k \right]^2$$

を最小とするδx_k を求めるのが最小二乗法である。ここで二乗するのは、キャンセルが起こらないようにするためである。上式が最小となる条件は、

$\frac{\partial S}{\partial x_k} = 0 \ (k = 1 \sim n)$　すなわち、$\frac{\partial S}{\partial x_1} = 0, \frac{\partial S}{\partial x_2} = 0, \cdots, \frac{\partial S}{\partial x_n} = 0$である。これを適用すると、

$$\frac{\partial S}{\partial x_1} = 2\sum_{i=1}^{N} \left[\delta A_i^{(1)} - \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial A}{\partial x_k} \delta x_k \right] \cdot \left(-\frac{\partial A}{\partial x_1} \right) = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial x_2} = 2\sum_{i=1}^{N} \left[\delta A_i^{(1)} - \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial A}{\partial x_k} \delta x_k \right] \cdot \left(-\frac{\partial A}{\partial x_2} \right) = 0$$

・・・・

$$\frac{\partial S}{\partial x_n} = 2\sum_{i=1}^{N} \left[\delta A_i^{(1)} - \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial A}{\partial x_k} \delta x_k \right] \cdot \left(-\frac{\partial A}{\partial x_n} \right) = 0$$

を得る。

計算式の導出その3

$\sum_{k=1}^{n}$ を展開し整理すると、

$$
\begin{aligned}
&\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial A}{\partial x_1}\right)^2 \delta x_1 + \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial A}{\partial x_1}\right)\left(\frac{\partial A}{\partial x_2}\right)\delta x_2 + \cdots + \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial A}{\partial x_1}\right)\left(\frac{\partial A}{\partial x_n}\right)\delta x_n = \sum_{i=1}^{N}\delta A_i^{(1)}\frac{\partial A}{\partial x_1}\\
&\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial A}{\partial x_2}\right)\left(\frac{\partial A}{\partial x_1}\right)\delta x_1 + \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial A}{\partial x_2}\right)^2 \delta x_2 + \cdots + \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial A}{\partial x_2}\right)\left(\frac{\partial A}{\partial x_n}\right)\delta x_n = \sum_{i=1}^{N}\delta A_i^{(1)}\frac{\partial A}{\partial x_2}\\
&\qquad\vdots\\
&\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial A}{\partial x_n}\right)\left(\frac{\partial A}{\partial x_1}\right)\delta x_1 + \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial A}{\partial x_n}\right)\left(\frac{\partial A}{\partial x_2}\right)\delta x_2 + \cdots + \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial A}{\partial x_n}\right)^2 \delta x_n = \sum_{i=1}^{N}\delta A_i^{(1)}\frac{\partial A}{\partial x_n}
\end{aligned}
$$

となる。マトリクスを用いて表せば、

$$
\begin{bmatrix}
\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial A}{\partial x_1}\right)^2 & \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial A}{\partial x_1}\right)\left(\frac{\partial A}{\partial x_2}\right) & \cdots\ \cdots & \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial A}{\partial x_1}\right)\left(\frac{\partial A}{\partial x_n}\right)\\
\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial A}{\partial x_2}\right)\left(\frac{\partial A}{\partial x_1}\right) & \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial A}{\partial x_2}\right)^2 & \cdots\ \cdots & \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial A}{\partial x_2}\right)\left(\frac{\partial A}{\partial x_n}\right)\\
\vdots & \vdots & & \vdots\\
\vdots & \vdots & & \vdots\\
\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial A}{\partial x_n}\right)\left(\frac{\partial A}{\partial x_1}\right) & \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial A}{\partial x_n}\right)\left(\frac{\partial A}{\partial x_2}\right) & \cdots\ \cdots & \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial A}{\partial x_n}\right)^2
\end{bmatrix}
\overset{\textbf{変数}}{\begin{bmatrix}\delta x_1\\ \delta x_2\\ \vdots\\ \vdots\\ \delta x_n\end{bmatrix}}
=
\begin{bmatrix}
\sum_{i=1}^{N}\delta A_i^{(1)}\frac{\partial A}{\partial x_1}\\
\sum_{i=1}^{N}\delta A_i^{(1)}\frac{\partial A}{\partial x_2}\\
\vdots\\
\vdots\\
\sum_{i=1}^{N}\delta A_i^{(1)}\frac{\partial A}{\partial x_n}
\end{bmatrix}
$$

計算式の導出その4

上式を解いてδx_kを求め$x_k^{(1)}$を補正する。２次近似値$x_k^{(2)}$は、

$$x_k^{(2)} = x_k^{(1)} + \delta x_k \quad (k = 1 \sim n)$$

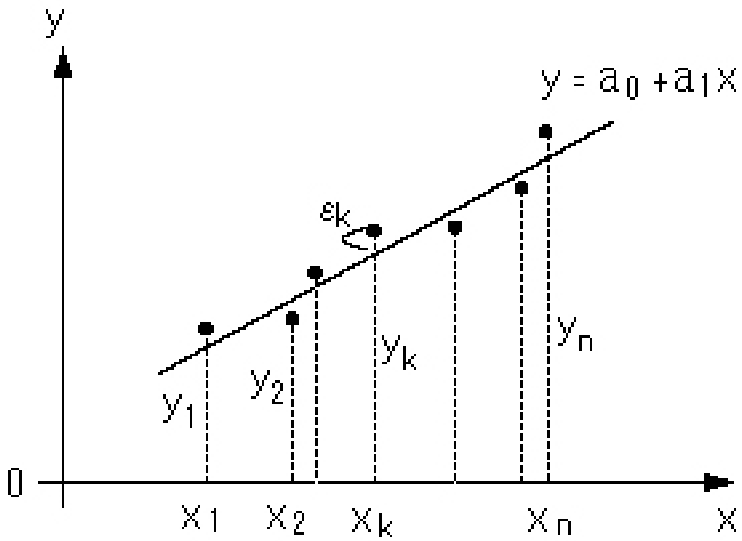
通常$x_k^{(2)}$は直ちに最確値にはならない。同様の補正を繰り返し、補正の効果がなくなった時の$x_k^{(s)}$を最確値とする。

最確値群$x_k^{(s)}$の評価には、標準偏差

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(\delta A_i^{(s)}\right)^2}$$

を用いる。

適用例



$$\varepsilon_k = y_k - (a_0 + a_1 x_k)$$ a_0, a_1を求める。

データポイントの全ての誤差の平方を総和した適合の全誤差 (total error) **は、**

$$E = \sum_{k=1}^{n} {\varepsilon_k}^2 = \sum_{k=1}^{n} [y_k - (a_0 + a_1 x_k)]^2$$

キャンセルが起こらぬよう平方されている。

最良の適合は全誤差を最小にする位置となる。

⟶ **Eの導関数がゼロとなるようにする。**

$$\frac{\partial E}{\partial a_0} = 2\sum_{k=1}^{n} [y_k - (a_0 + a_1 x_k)] \cdot (-1) = 0 \longrightarrow n a_0 + a_1 \sum_{k=1}^{n} x_k = \sum_{k=1}^{n} y_k$$

$$\frac{\partial E}{\partial a_1} = 2\sum_{k=1}^{n} [y_k - (a_0 + a_1 x_k)] \cdot (-x_k) = 0 \longrightarrow a_0 \sum_{k=1}^{n} x_k + a_1 \sum_{k=1}^{n} {x_k}^2 = \sum_{k=1}^{n} x_k y_k$$

マトリクスの形にすると、

$$\begin{bmatrix} n & \sum_{k=1}^{n} x_k \\ \sum_{k=1}^{n} x_k & \sum_{k=1}^{n} {x_k}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^{n} y_k \\ \sum_{k=1}^{n} x_k y_k \end{bmatrix}$$

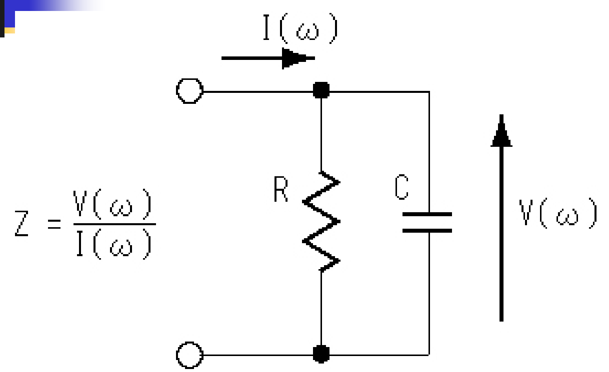
$[A][a] = [b]$より、
$[a] = [A]^{-1}[b]$が求まる。

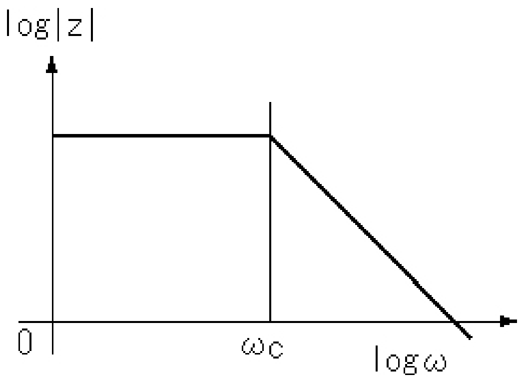
練習問題9．1

理想的には直線関係にある次の一組のデータより、
a0,a1**の各係数の最確値を求めなさい。**

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
x	0.00	1.00	2.00	3.00	4.00
y	0.99	0.03	-1.02	-1.94	-3.04
	y_1	y_2	y_3	y_4	y_5

参考（適用例2）





測定するのは|z|　　$z = \dfrac{R}{1 + j\omega CR}$

$$|z| = \frac{R}{\sqrt{1+(\omega CR)^2}} = \frac{R}{\sqrt{1+\left(\dfrac{\omega}{\omega_c}\right)^2}} \qquad \text{ただし、} \omega_c = \frac{1}{RC} \qquad \text{式（A−1）}$$

$|z|$の測定値を$M_i (i = 1 \sim N)$とする。

$\omega << \omega_c$のとき、$|z| \cong R$，　$\omega >> \omega_c$のとき、$|z| \cong \dfrac{1}{\omega C}$と考えられるので、

1) RとCの1次近似値を決定する。

$$R^{(1)} = M_1$$
$$C^{(1)} = 1/\omega_N M_N$$

適用例2その2

2)　$R^{(1)}$の補正　　**補正は相対値で行うこととする。**

$$\frac{M_i - |z|_i^{(1)}}{|z|_i^{(1)}} = \frac{\delta |z|_i^{(1)}}{|z|_i^{(1)}} \cong \left[\frac{R}{|Z|}\frac{\partial |Z|}{\partial R}\right]_i^{(1)} \frac{\delta R}{R^{(1)}} + \left[\frac{C}{|Z|}\frac{\partial |Z|}{\partial C}\right]_i^{(1)} \frac{\delta C}{C^{(1)}},$$

$$\frac{\partial |Z|}{\partial R} = \frac{1}{\left\{1+(\omega RC)^2\right\}\sqrt{1+(\omega RC)^2}}$$

$$\left(\frac{f(x)}{g(x)}\right)' = \frac{f'(x)g(x) - f(x)g'(x)}{g(x)^2}$$ を使う。

$$\frac{\partial |Z|}{\partial C} = \frac{-\omega^2 R^3 C}{\left\{1+(\omega RC)^2\right\}\sqrt{1+(\omega RC)^2}}, \quad \frac{R}{|Z|} = \sqrt{1+(\omega RC)^2}, \quad \frac{C}{|Z|} = \frac{C}{R}\sqrt{1+(\omega RC)^2}$$

を使って、

$$\frac{R}{|Z|}\frac{\partial |Z|}{\partial R} = \frac{1}{1+(\omega RC)^2}, \quad \frac{C}{|Z|}\frac{\partial |Z|}{\partial C} = \frac{-(\omega RC)^2}{1+(\omega RC)^2}$$

相対値形式のマトリクスは、

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{N}\left[\frac{R}{|Z|}\frac{\partial |Z|}{\partial R}\right]^2 & \sum_{i=1}^{N}\left[\frac{R}{|Z|}\frac{\partial |Z|}{\partial R}\right]\left[\frac{C}{|Z|}\frac{\partial |Z|}{\partial C}\right] \\ \sum_{i=1}^{N}\left[\frac{C}{|Z|}\frac{\partial |Z|}{\partial C}\right]\left[\frac{R}{|Z|}\frac{\partial |Z|}{\partial R}\right] & \sum_{i=1}^{N}\left[\frac{C}{|Z|}\frac{\partial |Z|}{\partial C}\right]^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\delta R}{R} \\ \frac{\delta C}{C} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{N}\frac{\delta |Z|}{|Z|}\left[\frac{R}{|Z|}\frac{\partial |Z|}{\partial R}\right] \\ \sum_{i=1}^{N}\frac{\delta |Z|}{|Z|}\left[\frac{C}{|Z|}\frac{\partial |Z|}{\partial C}\right] \end{bmatrix}$$

適用例2その3

|z|の周波数特性はRの値のみに依存する領域と、Cの値のみに依存する領域に2分される。

$\longrightarrow$ 2つの関数は直交性が良い $\longrightarrow$ 対角項 0

$$\frac{\delta R}{R}=\sum_{i=1}^{N}\frac{\delta|Z|}{|Z|}\left[\frac{R}{|Z|}\frac{\partial|Z|}{\partial R}\right]\Bigg/\sum_{i=1}^{N}\left[\frac{R}{|Z|}\frac{\partial|Z|}{\partial R}\right]^2 \quad , \quad \frac{\delta C}{C}=\sum_{i=1}^{N}\frac{\delta|Z|}{|Z|}\left[\frac{C}{|Z|}\frac{\partial|Z|}{\partial C}\right]\Bigg/\sum_{i=1}^{N}\left[\frac{C}{|Z|}\frac{\partial|Z|}{\partial C}\right]^2$$

より補正量を算出する。これを用いて、

$$R^{(2)}=R^{(1)}\left(1+\frac{\delta R}{R^{(1)}}\right) \quad , \quad C^{(2)}=C^{(1)}\left(1+\frac{\delta C}{C^{(1)}}\right)$$

の2次近似値を算出。

これを繰り返して補正の効果がなくなった時点の値を最確値とする。

この場合、標準偏差σ_rは、

$$\sigma_r=\sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left[\frac{M_i-|z|_i^{(s)}}{|z|_i^{(s)}}\right]^2}$$

<u>**異常データの検出について**</u>

データ測定確度より大きい $\left(M_i-|z|_i^{(s)}\right)/|z|_i^{(s)}$ があるか否かをチェック。

通常は測定確度内のはず。$\rightarrow$ 計測器に誤動作が生じた可能性がある。