

実験ゼミ 6/3 担当 馬場

No.1

4.6 Propagation of Errors

誤差の伝播

測定値を用いて計算すると、計算結果には
測定値の誤差が含まれる。

ある量 $u = f(x, y)$ x, y の誤差 σ_x, σ_y

$$u \text{ の分散 } \sigma_u^2 \equiv E[(u - \bar{u})^2] \quad (4.61)$$

$$\bar{u} = f(\bar{x}, \bar{y})$$

 $(u - \bar{u})$ を 1 次まで展開

$$(u - \bar{u}) \simeq (x - \bar{x}) \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{\bar{x}} + (y - \bar{y}) \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{\bar{y}} \quad (4.62)$$

よって、

$$E[(u - \bar{u})^2]$$

$$\simeq E \left[(x - \bar{x})^2 \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)^2 + (y - \bar{y})^2 \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)^2 + 2(x - \bar{x})(y - \bar{y}) \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial y} \right]$$

$$\sigma^2 = E[(x - \bar{x})^2] = \int (x - \bar{x})^2 P(x) dx \quad (4.9) \quad (4.63)$$

$$\text{COV}(x, y) = E[(x - \bar{x})(y - \bar{y})] \quad (4.10) \quad \text{より、}$$

$$\sigma_u^2 \simeq \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)^2 \sigma_x^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)^2 \sigma_y^2 + 2 \text{COV}(x, y) \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial y} \quad (4.64)$$

4.6.1 Examples.

i) 和: $u = x + y$

$$\sigma_u^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2 + 2\text{cov}(x, y) \quad (4.65)$$

ii) 差: $u = x - y$

$$\sigma_u^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2 - 2\text{cov}(x, y) \quad (4.66)$$

共分散が0だと、和も差も σ_x, σ_y の2乗和になる。

※ 相対誤差 $\frac{\sigma_u}{u}$ は差のほうが大きくなる。⇒ 差をとると損、
 なるべく差は計算ではなく、直接測ったほうがよい。

iii) 積: $u = xy$ $\frac{\partial f}{\partial x} = y, \frac{\partial f}{\partial y} = x$

$$\sigma_u^2 = y^2 \sigma_x^2 + x^2 \sigma_y^2 + 2\text{cov}(x, y)xy \quad \text{両辺 } u^2 = x^2 y^2 \text{ で割ると}$$

$$\frac{\sigma_u^2}{u^2} \approx \frac{\sigma_x^2}{x^2} + \frac{\sigma_y^2}{y^2} + 2 \frac{\text{cov}(x, y)}{xy} \quad (4.67)$$

iv) 比 $u = \frac{x}{y}$ $\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{1}{y}, \frac{\partial f}{\partial y} = -\frac{x}{y^2}$

$$\sigma_u^2 \approx \frac{1}{y^2} \sigma_x^2 + \frac{x^2}{y^4} \sigma_y^2 - 2 \text{cov}(x, y) \cdot \frac{x}{y^3} \quad u^2 = \frac{x^2}{y^2} \text{ で割ると}$$

$$\frac{\sigma_u^2}{u^2} \approx \frac{\sigma_x^2}{x^2} + \frac{\sigma_y^2}{y^2} - 2 \frac{\text{cov}(x, y)}{xy}$$

共分散を除けば、積と比は同じ形。

相対誤差が小さいときは、この式でOK。

※ x, y が小さいときも、補正が必要。

No. 3.

Example 4.6 散乱の左右非対称性の測定

陽子or中性子ビームの散乱を、左右同じ角度で計測。

右側への散乱数をR, 左側への散乱数をLとおくと、

$$\text{非対称性 } \varepsilon = \frac{R-L}{R+L} \quad N_{\text{tot}} = R+L$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial R} = \frac{2L}{(R+L)^2} = \frac{2L}{N_{\text{tot}}^2}, \quad \frac{\partial \varepsilon}{\partial L} = \frac{-2R}{N_{\text{tot}}^2} \quad \text{より、}$$

$$\sigma^2(\varepsilon) \simeq \frac{4L^2}{N_{\text{tot}}^4} \sigma_R^2 + \frac{4R^2}{N_{\text{tot}}^4} \sigma_L^2 \quad (R, L \text{ は独立なので、} \text{cov} = 0)$$

RとLはPoisson分布をとるので、 $\sigma_R^2 = R$, $\sigma_L^2 = L$

$$\therefore \sigma^2(\varepsilon) \simeq 4 \frac{(L^2 R + R^2 L)}{N_{\text{tot}}^4} = 4 \frac{RL}{N_{\text{tot}}^3}$$

非対称性が「半分」小さければ、 $R \simeq L \simeq \frac{N_{\text{tot}}}{2}$ より、

$$\sigma(\varepsilon) = \sqrt{\frac{1}{N_{\text{tot}}}}$$

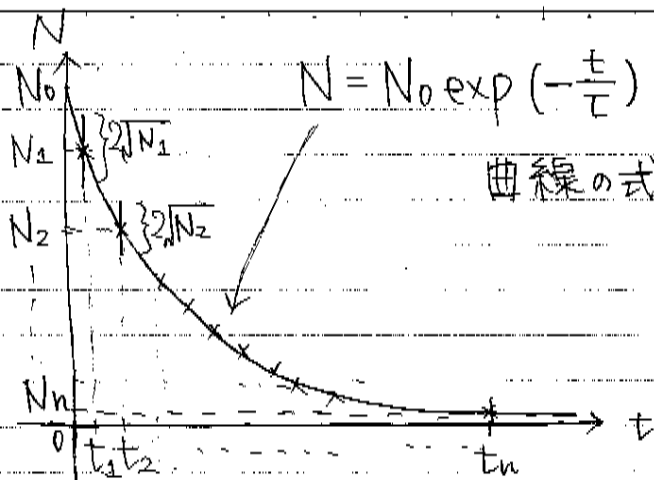
4.7. Curve Fitting

フィッティング... 測定点を通るような曲線を求めて
parametersを得る。例. 放射線源の寿命 τ を求める。

時間	t_1	t_2	...	t_n
Count	N_1	N_2	...	N_n

測定結果 $\uparrow$

グラフにプロットすると、



$N = N_0 \exp(-\frac{t}{\tau})$ という曲線が引けるはず。

曲線の式から τ を求める。

Count 数 N_i は誤差 $\sigma_i = \sqrt{N_i}$ をもつ。

N_0 や τ をどのように決めるか?



4.7.1. The Least Squares Method (最小二乗法)

n 個の点 x_i で、誤差 σ_i をもつ変数 y_i を測定。

それを関数 $f(x; a_1, a_2, \dots, a_m)$ にフィットさせる。

↑ ↑ ↑ 未知 parameters

最小二乗法では、値 S

$$S = \sum_{i=1}^n \left[\frac{y_i - f(x_i; a_j)}{\sigma_i} \right]^2 \quad (4.70)$$

を極小にする $a_1, a_2, \dots, a_j, \dots, a_m$ を求める。

(4.70) はカイ二乗に似ているが、これはガウス分布とは限らない。

この方法はもとの分布の形を必要としない。

わかっていれば「最尤法」が使える。

No. 5

$$\frac{\partial S}{\partial a_j} = 0 \quad (4.71) \text{ を解く.}$$

解析的に解けることもあるが、一般的にはコンピュータで数値的に解く。

求めた a_j の分散及び共分散は

誤差行列 $V = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \text{cov}(1,2) & \text{cov}(1,3) & \dots \\ & \sigma_2^2 & \text{cov}(2,3) & \dots \\ & & \ddots & \ddots \\ & & & \sigma_n^2 \end{pmatrix}$ を用いて、

$$(V^{-1})_{ij} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial a_i \partial a_j} \quad \text{と与えられる。}$$

4.7.2. 線形フィッティング (直線)

$f(x; a_j)$ が線形の場合は、解析的に解ける。(詳細省略)

f の妥当性を調べるには、得た $f(x)$ でカイ乗検定をする。

$f(x)$ が妥当で、誤差がガウス分布なら $S = \chi^2$ となり、

平均値が自由度 ν になる。 ($\nu = n - m$)

手取り早く検定したければ、

$$\frac{\chi^2}{\nu} = \frac{S}{\nu} \quad \text{これが 1 に近ければよい。} \quad (4.83)$$

より正確な検定をしたければ、

$P(\chi^2 \geq S)$ を調べる。 5% 以上なら妥当

★ S が小さすぎる場合

誤差を大きくとりすぎているケースが多い。

エラーバーは 1σ の幅がりがあるので、

データ点の 1/3 ぐらいは f から外れる。

Example 4.8

指数関数も直線 fit ができる。

先程の $N = N_0 \exp(-\frac{t}{\tau})$ の両辺対数を取り、

$$\ln N = -\frac{t}{\tau} + \ln N_0 \quad a = -\frac{1}{\tau}, b = \ln N_0 \text{ とし}$$

最小二乗法を適用

(注意点) N の誤差 $\sigma(N) = \sqrt{N}$ が $\ln N$ を通じて伝播。

$$\sigma^2(\ln N) = \left(\frac{\partial \ln N}{\partial N}\right)^2 \sigma^2(N) = \frac{1}{N^2} N = N^{-1}$$

↓

$$\chi^2 = 15.6, \nu = 8 \quad \frac{15.6}{8} \approx 1.95 \text{ 1. は大きい。 } (P(\chi^2 \geq 8) \text{ は } 0.6)$$

- background C を考慮に入れない

$$N(t) = N_0 \exp(-\frac{t}{\tau}) + C$$

- 崩壊が 2 つ以上起きているのでは?

→ $N(t)$ が指数関数の和になる → 非線形

4.7.3 Linear Fits When Both Variables Have Errors

一般的に、変数 x にも誤差をもつ。そのとき、

$$\sigma_z^2 \rightarrow \sigma_y^2 + \left(\frac{df}{dx}\right)^2 \sigma_x^2 \quad (4.84)$$

とおきかえる。 σ_x, σ_y は x, y の誤差

$\frac{df}{dx}$ はパラメータ a を含み、 S が非線形になるのでは。

数値計算が必要になる。

No. 7.

4.7.4 Nonlinear Fits

非線形フィットは、 S の極小化のための数値的解法が必要。

関数の最大、最小化問題

Function Minimization Techniques

実際の手法としては、極小値を満たすまで反復的に

パラメータを変化させ続ける。

→ 収束の速さと発散のしにくさが計算方法を選ぶ基準になる。

今回は2つ紹介する。

① 格子法

② 勾配法

① 格子法 $F(x)$ について、

一定間隔 Δx ごとに点を取り、 $F(x)$ が最小となる点を探す。

- x が有限の範囲でしか使えない。
- 2次元以上になると、計算数が莫大な数になる。

(★ モンテ・カルロ法 一定間隔のかわりにランダムな x の点をとる。)

乱数生成のために熱運動などを使う

時間がかかりすぎるので、評価計算の回数を減らそうとする。

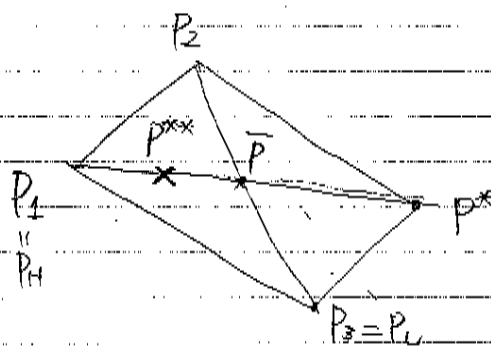
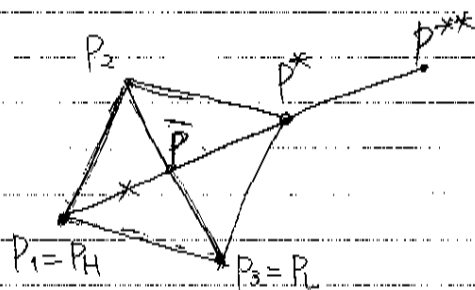
→ シンプレックス法

・シンプレックス法

シンプレックス (単体) ... n 次元で $n+1$ 個頂点をもつような図形

(cf. $n=2$... 三角形, $n=3$... 四面体)
例として 2次元を考える。

・アルゴリズム



① 三点 P_i をとり、 $F(P_i)$ が最大の点と最小の点を調べる。

P_1 が最大, P_3 が最小とする。

② P_1 から重心を通る半直線を引き、 $\triangle P_1 P_2 P_3 \equiv \triangle P^* P_2 P_3$ となるように半直線上に P^* をとる。

③ (a) もし、 $F(P^*)$ が $F(P_3=PL)$ より小さいなら、図の $\overline{PP^*}$ の長さぶんだけ更に半直線上を進んだ点 P^{**} をとる。

(P^* の方向に極小点があると思えるため)

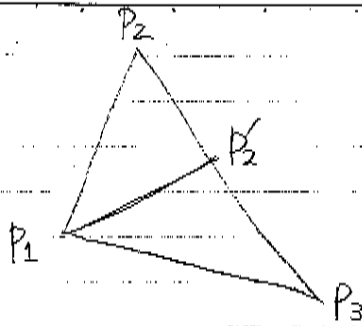
条件を満たし続ける限り操作を進める。

③ (b) もし、 $F(P^*)$ が $F(P_H=P_1)$ より大きいなら、

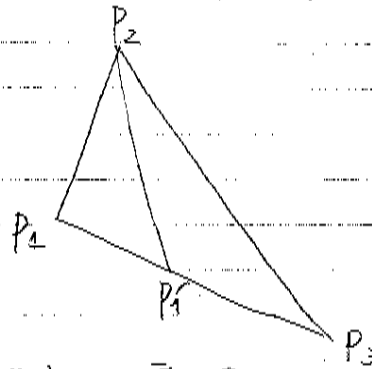
$P_1 P$ の中点に P^{**} をとる。

④ (a) or (b) を繰り返す。

No. 9



or



⑤ 手づかりになったら、考える三角形を小さく変える。

図では $\triangle P_1 P_2' P_3$ or $\triangle P_1' P_2 P_3$

ただし、最小点 P_3 は含む

この操作で、三角形が極小点に近づいていくはずである。

シンプレックス法は、関数の形に依らないので“優秀だが”
やはり収束まで“時間”がかかる。

② 勾配法

関数 $F(x)$ の微分を使う。最急降下法でも使われる。

• Newton法

$F(x)$ を x_0 近傍で Taylor 展開し、2次までとる。

$$F(x) \approx F(x_0) + \frac{\partial F}{\partial x} \bigg|_{x_0} (x - x_0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} \bigg|_{x_0} (x - x_0)^2 \quad (4.86)$$

x の 2 次曲線

n 次元だと、

転置

$$F(x) \approx F(x_0) + g^T (x - x_0) + \frac{1}{2} (x - x_0)^T \tilde{G} (x - x_0) \quad (4.87)$$

$$g = g_i = \frac{\partial F}{\partial x_i}$$

No.10.

$$\Delta \text{シアン}; G = G_{ij} = \frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j}$$

$$\text{放物線 } f(x) = ax^2 + bx + c \quad (a > 0)$$

$$\text{の最小値をとる } x \text{ は } x_{\min} = \frac{-b}{2a} \text{ となる。}$$

(4.87)でも同様に考えて、

$$x_{\min} - x_0 = -G^{-1}g \quad \text{よって } x_{\min} = x_0 - G^{-1}g \quad (4.88)$$

この $x_{\min}$ は真の極小値ではないが、続けて $x_{\min}$ まわりに展開させて操作を繰り返せば、収束解が得られる。

・収束が速い

注意点. G は正の値でないとダメ。負だと発散 →

人為的に G を正の値で取れる範囲内に

おいては、この方法は非常に強力

・ G の評価と逆数の計算が必要

最小二乗法に適用

$$(4.70) \text{ を、 } S = \sum_k S_k^2 = \sum_k \left[\frac{y_k - f(x_k)}{\sigma_k} \right]^2 \quad (4.89) \text{ とすると、}$$

$$\frac{\partial^2 S}{\partial x_i \partial x_j} = 2 \sum_k \left(\frac{\partial S_k}{\partial x_i} \frac{\partial S_k}{\partial x_j} + S_k \frac{\partial^2 S_k}{\partial x_i \partial x_j} \right) \quad \text{線形では}$$

↑ 2階微分 → 0

$$\therefore G_{ij} \approx 2 \sum_k \frac{\partial S_k}{\partial x_i} \frac{\partial S_k}{\partial x_j} > 0$$

これから導かれる共分散行列は、正しい値に収束するとは限らない。

値は出るが、誤差が正しく出ない可能性がある。

No.11

Local vs Global Minima

今まで求めてきたのは極小値のうちの1つなのでそれが求めるものか
確かめる必要がある。→正しい範囲を定む

折れ込みが起こることもある。→正しい初期値設定が大事

Errors 誤差をどう出すか。

1次元の最小2乗法を考える。パラメータ = θ (4.92)より、

$$a^2 = \left| \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial \theta^2} \right|^{-1}$$

$S(\theta)$ の極小値 θ^* まわりの展開

$$\begin{aligned} S(\theta) &= S(\theta^*) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial \theta^2} (\theta - \theta^*)^2 \\ &= S(\theta^*) + \frac{1}{a^2} (\theta - \theta^*)^2 \end{aligned}$$

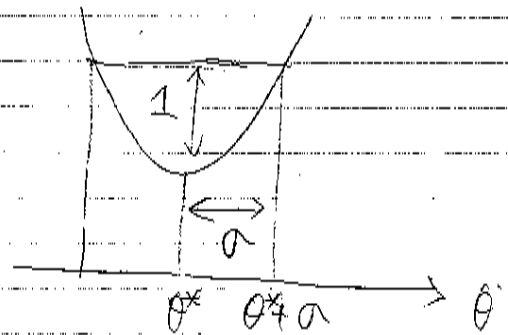
$\theta = \theta^* + a$ を代入すると、

$$S(\theta^* + a) = S(\theta^*) + 1 \quad (4.94)$$

上式より、誤差は、 S が1増加するまでの変位となる。

これは一般の非線形関数にも適用できる。

極小値が1増加する各点を見ることになる。



4.8 Some General Rules for Rounding-off

Numbers for Final Presentation

最後に、求めた数値解をどこまで切り捨てればよいか？
数値の桁数は誤差によって決定する。

例 $x = 17.615334$, $\sigma(x) = 0.0233$

誤差は最初の有効数字だけが意味を持つので、
それ以降の桁は不必要。だが、他の解析で使うためにも、
最初の2桁を残すのも良い。

よって、 $\sigma = 0.0233 \rightarrow 0.023$

x は小数3桁までを使う。

$17.615334 \rightarrow 17.615$

・四捨五入について

省いた数字(今回は334)を、

0.334 のように表す。そして、これが

(i) 0.5 より小ければ x の最小桁はそのまま。

(ii) 0.5 より大ならば、" " に 1 加える。

(iii) ちょうど 0.5 なら、" " が奇数なら 1 加える
" " が偶数ならそのまま。

今回は (i) なので、

$x = 17.615 \pm 0.023$

(注). 同じ数値に2回四捨五入を適当には行かない。

$2.346 \rightarrow 2.35 \rightarrow 2.4$
 $\quad \quad \quad \rightarrow 2.3$