K科　H.Takiyama

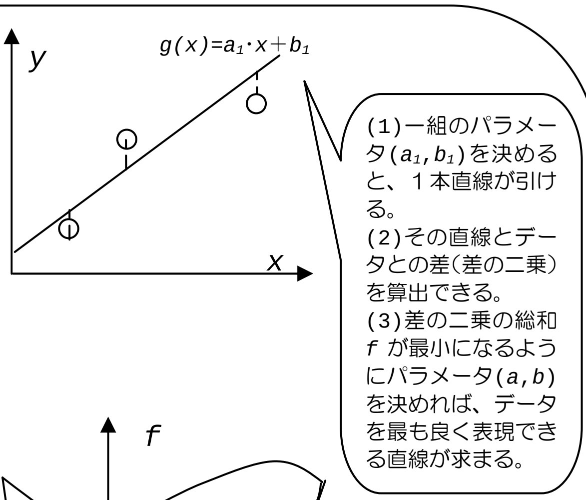
最 小 二 乗 法 と 最 適 化

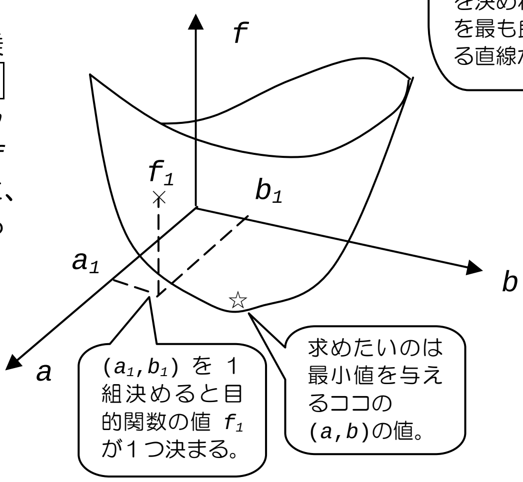
ここに、あるパラメータ p,q,r,･･･で表現される関数 f(p,q,r･･･)がある。このとき目的となる関数 f を最小化（あるいは最大化、あるいは 0 を含む定数化）するパラメータを求めることを最適化と言う。

最小二乗法：ある N 個のデータ(x_i,y_i)（i=1,2,･･･,N)をある関数 g で表現したい。このとき関数 g はパラメータ a,b,･･･で表現される(一次方程式の場合は a と b)。

→ あるパラメータ a_1,b_1,･･･を仮に決めれば、x_i に対して計算値 y'_1,y'_2,･･･,y'_N を求めることができ、さらに実際のデータ y_1,y_2,･･･y_N と比較することができる。

→ 比較によって計算できる残差の二乗和 $f=\Sigma(y'_i-y_i)^2$ を$\boxed{\text{最適化のための目的関数 } f}$とすれば、この目的関数 f のパラメータも a,b,･･･。したがって目的関数 f を最小にするようなパラメータを求めると、結局ある N 個のデータを最も良く表現する関数 g を求めたことになる。

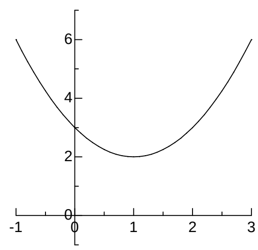




この最適化の概念は物質収支の概念に引けを取らないくらいに超重要。

Excel には最適化を簡潔に行うために「ソルバー」なるツールが用意されている。
そこで指定するのは目的セル（目的関数）と目的値（最小化、定数、最大化）と変化させるセル（パラメータ）である。もちろん目的セルを決めるのは我々。

例題０
$y=x^2-2X+3$ の最小値を与える x を求めなさい。　(答え x=1)
（目的関数は y でパラメータを x とすれば上の「ソルバー」が使えそう。）



	A	B	C
1	x=	3	
2	y=	6	
3			
4			
5			

初期値として適当な数字を入れておく。ここでは 3

=B1^2-2*B1+3
セル(B1)の２乗から 2 倍のセル(B1)を引き、3 を足す。

	A	B	C
1	x=	1	
2	y=	2	
3			

まず目的セル(B2)を選択した状態でソルバーを立ち上げる。

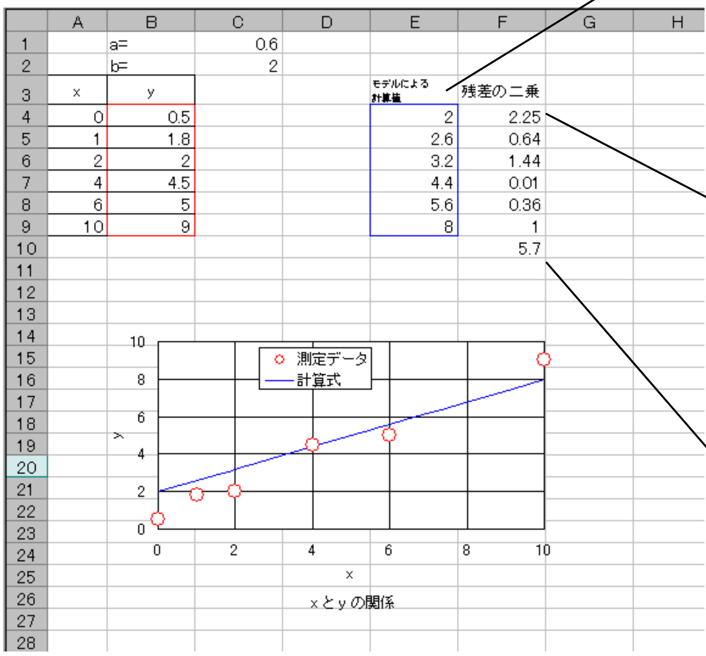
目的セル(B2)
目標値(最小値)
変化させるセル(B1)を選択して実行。

例題１

　ここに、ｘとｙの６つの実験データの組がある。経験的に理論式 y=a*x + B に従うことが分かっているとき。パラメータａとｂを決めなさい。

Table1 ｘとｙの関係

x	y
0	0.5
1	1.8
2	2
4	4.5
6	5
10	9



=$C$1*A4+$C$2
“$”マークはセルをコピーしても動かしたくないセルの列と行に付ける。この場合Ｃ列１行とＣ列２行のセルは動かしたくない。

モデルによる計算値(Ｅ列)と実際の値(Ｂ列)をそれぞれ評価する(差の２乗を求める)。
２乗にする理由を考えよう。

=SUM(F4:F9)
F4 から F9 までの総和を求める。
このセルの値が最も小さくなれば、モデルによる計算値とＰの値とが一致することになる。
　すなわちこのセルが目的セル

発展問題

　ここに、時間ｔと物理量Ｐの５つの実験データの組がある。経験的に理論式 P=a*exp(-b·t)に従うことが分かっているとき。パラメータａとｂを決めなさい。

Table1 Ｐの経時変化

t	P
0	3
1	1.75
2	1
4	0.5
6	0.2
10	0.01