測定誤差の取り扱い

１．区間推定法

ここでは，何回かの測定で得られたバラツキのある測定値から，真の値の存在する範囲を見積もる方法を説明する（これを「区間推定法」と呼ぶ）．本文で系統誤差と偶然誤差について説明したが，ここでは系統誤差は存在しないものと仮定して（つまり較正がなされているとして）説明を進める．

今仮に，ある測定を，全く同じ条件，同じ測定者で繰り返したとする．通常は実験を繰り返すと言っても数回だが，ここではそうではなくて，何千回も繰り返したと仮定する．そうすると，測定結果の度数分布（ヒストグラム）は図１のようになる．

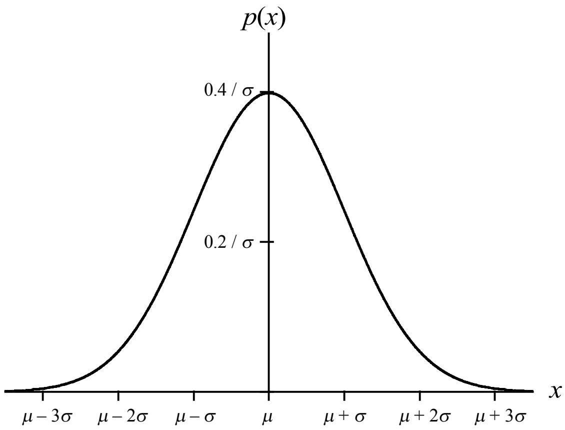

図１　正規分布

本文でもこの分布の形が出てきたが，これを正規分布（またはガウス分布）と呼ぶ．正規分布を表す式は次のようになる．

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma} e^{-(x-\mu)^2/2\sigma^2} \tag{1}$$

分布の形を決めるのは，2 つのパラメーター，μ と σ である．このうち μ は分布の中央の位置を決め，σ は分布の広がりを決めている．μ を「平均」，σ を「標準偏差」と呼ぶ．次に，(1) 式の性質の幾つかを示す．

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(x)\,\mathrm{d}x = 1\,, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} x\,p(x)\,\mathrm{d}x = \mu\,, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} (x-\mu)^2\,p(x)\,\mathrm{d}x = \sigma^2 \tag{2}$$

実際の測定にあてはめて考えると，<u>平均値 μ は真の値</u>であり，<u>標準偏差 σ は偶然誤差の大きさ</u>である．偶然誤差の大きさは，たとえば滴定の実験であれば，ホールピペットの標線に水溶液の液面をどれだけ正しく合わせるか，というようなことが影響するので，測定

者が誰であるかということにも依存する．

さらに，(1) 式には次のような性質もある．

$$\int_{\mu-\sigma}^{\mu+\sigma} p(x)\,\mathrm{d}x = 0.682\ , \qquad \int_{\mu-2\sigma}^{\mu+2\sigma} p(x)\,\mathrm{d}x = 0.954\ , \qquad \int_{\mu-3\sigma}^{\mu+3\sigma} p(x)\,\mathrm{d}x = 0.997 \tag{3}$$

これらの式の意味する所は，「１回の測定で得られた値が，$\mu-\sigma$ と $\mu+\sigma$ の間にある確率が 68.2 %，$\mu-2\sigma$ と $\mu+2\sigma$ の間にある確率が 95.4 %，$\mu-3\sigma$ と $\mu+3\sigma$ の間にある確率が 99.7 % である」ということである．これを視点を変えて表現すると，「１回の測定で，測定値 x が得られたとき，真の値 μ が $x\pm\sigma$ の間にある確率が 68.2 %，$x\pm2\sigma$ の間にある確率が 95.4 %, $x\pm3\sigma$ の間にある確率が 99.7 % である」ということになる．それなら，１回だけの測定で得られた結果 x を元に，たとえば「真の値は，95.4 % の確かさで $x\pm2\sigma$ の間にある」と言えば「真の値の存在する範囲の見積もり」ができたことになりそうだが，問題は，１回だけの測定では標準偏差 σ の値がわからない，ということである．標準偏差 σ の値を見積もるには測定は複数回行わなければならない．

さてそれでは，測定を無限回ではなく数回だけ行った場合のことを考える．何回かの測定を行った後で，まずすることは平均値を求めることである．有限回の測定結果の平均値を「最確値」という．無限回の測定の平均値は真の値に一致するが，有限回の測定では必ずしも最確値は真の値とは一致せず，その近くに分布する．そこで今度は，「N 回（たとえば５回）の測定を行い，結果を平均して最確値 $\bar{x}$ を求める」という操作を無数に繰り返し，「最確値 $\bar{x}$ の分布」をグラフにしたとする．そうすると，最確値 $\bar{x}$ はやはり真の値を中心にした正規分布になるが，今度は分布の幅が $1/\sqrt{N}$ 倍に狭くなり，次の式で表される．

$$p(\bar{x}) = \frac{\sqrt{N}}{\sqrt{2\pi}\,\sigma}\mathrm{e}^{-(x-\mu)^2 N/2\sigma^2} \tag{4}$$

(1) 式で表した個々の測定値 x の分布と，(4) 式で表した最確値 $\bar{x}$ の分布を比べると，(1) 式の σ が(4) 式では $\sigma/\sqrt{N}$ に置き換えられていることがわかる．有限回の測定における測定値 x の分布と，最確値 $\bar{x}$ の分布の関係を図２に示す．

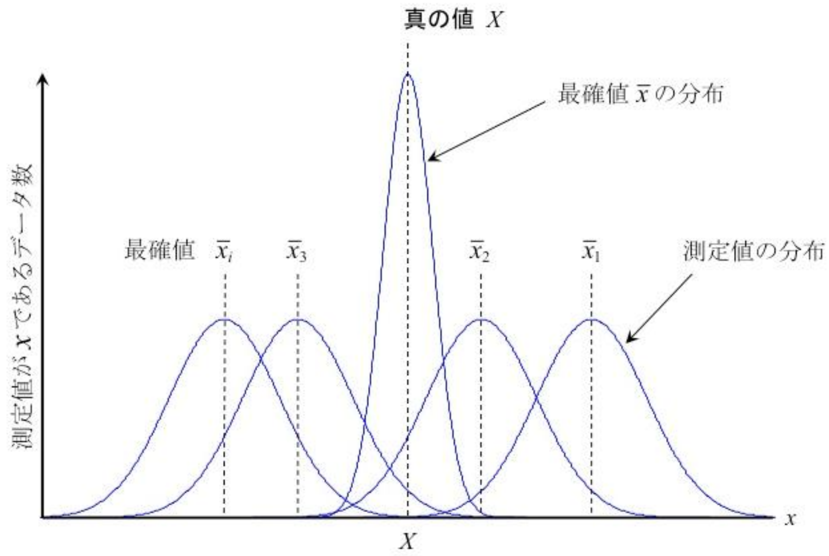

図２　測定値と最確値の分布

つまり今度は，N 回の測定で得られた最確値 $\bar{x}$ を元に，たとえば「真の値は，95.4 % の確かさで $\bar{x} \pm 2\sigma/\sqrt{N}$ の間にある」と言うことができる．先ほどの１回だけの測定結果から推定する場合と比べて，真の値の存在する範囲は $1/\sqrt{N}$ に狭まった．ただし依然として標準偏差 σ の値は未知である．

真の値 μ と標準偏差 σ は，仮想の無限回の測定値の分布から得られるものであるが，有限回の測定結果からこれらの値の「推定値」を求めることができる．まず真の値 μ の推定値だが，これは言うまでもなく，最確値 $\bar{x}$ である．次に問題の標準偏差 σ だが，これは，N 回の測定値のばらつき具合から推定する．具体的には，次式で表される<u>標本標準偏差</u>　がその推定値である．

$$s \equiv \sqrt{\sum_{i=1}^{N}\left(x_i - \bar{x}\right)^2 \Big/ \left(N-1\right)} \qquad x_i \text{ は } i \text{ 番目の測定値} \tag{5}$$

これを使えば，「真の値は，95.4 % の確かさで $\bar{x} \pm 2s/\sqrt{N}$ の間にある」と言うことができる．この場合の 95.4 % を<u>信頼係数</u>と呼び，$\pm 2s/\sqrt{N}$ を<u>信頼区間</u>と呼ぶ．また，$s/\sqrt{N}$ を<u>標準誤差</u>と呼ぶ．信頼区間における標準誤差の係数（この例では ±2）と，信頼係数との関係は，信頼係数を高くすれば信頼区間も広くなる，というものなのだが，信頼係数を 100 % にしようとすると（つまり，絶対に外れない推定をしようとすると）対応する信頼区間は $\pm\infty$ となり，これは「真の値は $-\infty$ から $+\infty$ の間のどこかにある」と言っているだけで，意味をなさない．一方，信頼区間を狭く絞り込みたれば信頼係数を低くすればよいのだが，「真の値は $\bar{x} \pm s/\sqrt{N}$ の間にある」と言ったときの信頼係数は 68.2 % しかないので，たとえば１０人が信頼区間を $\pm s/\sqrt{N}$ に設定して計算した場合，そのうちの３人においては，真

の値は信頼区間の外にある，ということになる．通常用いられる信頼係数と信頼区間の組み合わせは，

信頼係数	信頼区間
95 %	$\pm 1.96 s/\sqrt{N}$
95.4 %	$\pm 2 s/\sqrt{N}$
99 %	$\pm 2.58 s/\sqrt{N}$
99.7 %	$\pm 3 s/\sqrt{N}$

といったところである．いずれにせよ，信頼区間を報告する際は，信頼係数を併記することが望ましい．同様に，論文やデータ集に報告されている物理量の値を用いる時は，併記された信頼区間がどの位の信頼係数に対応する値なのかに注意する必要がある．

以上のような手続きで，偶然誤差による信頼区間の幅を見積もることを，しばしば「誤差を見積もる」あるいは「誤差を付ける」と表現することがある．同様に，信頼区間の幅を「誤差」と表現することがある．

２．誤差伝播

実際の実験では 1 種類の測定から最終的な結果が求められることはまれで，いくつかの別々の測定結果から計算により最終的な結果を求めることが多い．その場合，元になるそれぞれの測定の偶然誤差が最終結果の偶然誤差に反映される．これを「誤差伝播」と呼ぶ．最も単純な例で，二つの別々な測定の結果の和を求める場合を考える．変数 x と y があり，それぞれが次のような正規分布に従うとする．

$$p_x(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma_x} \mathrm{e}^{-(x-\mu_x)^2 / 2\sigma_x^2}, \qquad p_y(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma_y} \mathrm{e}^{-(x-\mu_y)^2 / 2\sigma_y^2} \tag{6}$$

つまり，x の平均が μ_x，標準偏差が σ_x であり，y の平均が μ_y，標準偏差が σ_y である．これに対して，変数 x と y の和 $z = x + y$ を考え，その分布関数を計算すると次のようになる．

$$p_z(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} p_x(z-t)\, p_y(t)\ \mathrm{d}t = \frac{1}{\sqrt{2\pi\left(\sigma_x^2 + \sigma_y^2\right)}} \mathrm{e}^{-(z-\mu_x-\mu_y)^2 / 2\left(\sigma_x^2+\sigma_y^2\right)} \tag{7}$$

この式もまた，正規分布である．(7) 式を正規分布の式

$$p_z(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma_z} \mathrm{e}^{-(x-\mu_z)^2 / 2\sigma_z^2} \tag{8}$$

にあてはめると，次の関係が導かれる．

$$\begin{cases}\mu_z = \mu_x + \mu_y \\ \sigma_z = \sqrt{\sigma_x^2 + \sigma_y^2}\end{cases} \tag{9}$$

(9)式の上段は，「z の平均値は x と y それぞれの平均値の和になる」という，当然なものだが，下段の式は，z の標準偏差が x と y それぞれの標準偏差の単純な和にはならず，「二乗和の平方根」になることを示している．この関係は，標準偏差同士であっても標準誤差同士であっても同じである．

これを，より一般的に書くと次のようになる．今，互いに独立な測定で $x_1, x_2, \ldots, x_n$ という物理量を求め，その関数として別の物理量 y を計算したとする．すなわち

$$y = f(x_1, x_2, \ldots, x_n) \tag{10}$$

である．ここで，$x_1, x_2, \ldots, x_n$ の誤差（信頼区間の幅）を $\Delta x_1, \Delta x_2, \ldots, \Delta x_n$ とすると，y の誤差 Δy は次の式で計算される．

$$\Delta y = \sqrt{\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\right)^2 \left(\Delta x_1\right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)^2 \left(\Delta x_2\right)^2 + \cdots + \left(\frac{\partial f}{\partial x_n}\right)^2 \left(\Delta x_n\right)^2} \tag{11}$$

３．最小二乗法

図３は，バネに重りを吊るしてその長さを測定したものである．このグラフの各点のなるべく近くを通る直線を引けば，その切片からバネの自由長が求まり，傾きからバネ定数（の逆数）が求まる．この時の直線を回帰直線と呼ぶ．回帰直線を求めるには最小二乗法を用いる．ここで注意しておくことは，最小二乗法と言うのは一次関数だけでなくあらゆる関数に対して使われる分析法であり，回帰直線というのはその中の一例に過ぎないということである．ここからは回帰直線に限定せず，一般的な線形最小二乗法について説明する．

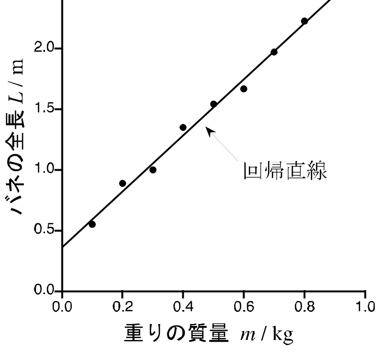

図３　バネに吊した重りの質量とバネの全長

今，仮に，$(x_1, y_1), (x_2, y_2), \cdots, (x_n, y_n)$ という n 組のデータが得られていて，横軸 x の値は誤差が無視できるほど精度良く求まっているとする．この n 組のデータが従うべき関数が分かっていて，そのパラメーターが未知の時（上の例で言えば，直線に乗ることは分かっているが傾きと切片が分からない時），n 組のデータを最も良く再現するパラメーターの値を求めるのが最小二乗法の目的である．関数の形を

$$y = f(x; c_1, c_2, \ldots, c_m) \tag{12}$$

とする．ここで $c_1, c_2, \ldots, c_m$ は求めるべきパラメーターである．i 番目の測定点の y の値の推定値を $\hat{y}_i$ とすると，

$$\hat{y}_i = f(x_i; c_1, c_2, \ldots, c_m) \tag{13}$$

となる．i 番目の y の実測値 y_i とこの推定値の差，$v_i \equiv y_i - \hat{y}_i$ を残差と呼ぶ．残差の二乗和 J（$J \equiv \sum_i^n \left(y_i - \hat{y}_i\right)^2$）が最小になるような $c_1, c_2, \ldots, c_m$ を求めるのが最小二乗法である．

ここから先は，行列表示を交えて説明する．線形最小二乗法では，y の値がパラメーター c_j の線形結合で書けると仮定する．すなわち

$$\hat{y}_i \equiv \sum_j^m A_{i,j}\, c_j \ , \qquad \left(A_{i,j} = \partial\hat{y}_i / \partial c_j \ , \quad i = 1,2,\cdots,n\right) \tag{14}$$

であるとする．ここで，

$$\boldsymbol{y} \equiv \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \quad \hat{\boldsymbol{y}} \equiv \begin{pmatrix} \hat{y}_1 \\ \hat{y}_2 \\ \vdots \\ \hat{y}_n \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{v} \equiv \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{c} \equiv \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_m \end{pmatrix} \tag{15}$$

のようにベクトル表示すれば，(14)式は次のように書ける．

$$\hat{\boldsymbol{y}} \equiv A\boldsymbol{c} \ , \qquad \left(A = \partial\hat{\boldsymbol{y}} / \partial\boldsymbol{c}\right) \tag{16}$$

行列 A はヤコビ行列と呼ばれる．これを使うと，残差 $\boldsymbol{v}$ とその二乗和 s は次のように書ける．

$$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{y} - A\boldsymbol{c} \ , \qquad J = \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v} = \left(\boldsymbol{y} - A\boldsymbol{c}\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{y} - A\boldsymbol{c}\right) \tag{17}$$

行列の右肩に T が付いたものは転置行列である．残差二乗和 J が最小になる条件は

$$\begin{pmatrix} \partial J / \partial c_1 \\ \partial J / \partial c_2 \\ \vdots \\ \partial J / \partial c_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \tag{18}$$

である．これを(17)式を用いて行列表示で書くと次のようになる．

$$\mathbf{0} = \frac{\partial J}{\partial \boldsymbol{c}} = \frac{\partial \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}}{\partial \boldsymbol{c}} \boldsymbol{v} + \left(\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial \boldsymbol{c}} \right)^{\mathrm{T}} = -A^{\mathrm{T}} \boldsymbol{v} - \left(\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} A \right)^{\mathrm{T}} = -2A^{\mathrm{T}} \boldsymbol{v} = -2A^{\mathrm{T}} \left(\boldsymbol{y} - A\boldsymbol{c} \right) \tag{19}$$
$$\therefore\ A^{\mathrm{T}} \boldsymbol{y} = A^{\mathrm{T}} A \boldsymbol{c}$$

よって，パラメーターベクトル $\boldsymbol{c}$ は次のように求められる．

$$\boldsymbol{c} = \left(A^{\mathrm{T}} A \right)^{-1} A^{\mathrm{T}} \boldsymbol{y} \tag{20}$$

行列の右肩に–1 が付いたものは逆行列である．

さて，ここで最初の例に戻って回帰直線を求める．(13)式に相当する式は,

$$\hat{y}_i = c_1 + c_2 x_i \tag{21}$$

となり c_1 と c_2 が求めるパラメーター（それぞれ切片と傾き）である．(14)式のヤコビ行列は，n 行 2 列の行列（n は測定点の数）で，次のようになる．

$$A = \begin{pmatrix} \partial \hat{y}_1 / \partial c_1 & \partial \hat{y}_1 / \partial c_2 \\ \partial \hat{y}_2 / \partial c_1 & \partial \hat{y}_2 / \partial c_2 \\ \vdots & \vdots \\ \partial \hat{y}_n / \partial c_1 & \partial \hat{y}_n / \partial c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{pmatrix} \tag{22}$$

これを(20)式に代入して c_1 と c_2 を求めると次のようになる．

$$c = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{n\sum x_i^2 - \left(\sum x_i \right)^2} \begin{pmatrix} \sum x_i^2 \cdot \sum y_i - \sum x_i \cdot \sum x_i y_i \\ -\sum x_i \cdot \sum y_i + n \sum x_i y_i \end{pmatrix} \tag{23}$$

次に, 最小二乗法で求めたパラメーターc_jの標準誤差の求め方について述べる. まず, (20)式によって得られたパラメーター，$c_1, c_2, \ldots, c_m$，を用いて各測定点の推定値 $\hat{y}_i$ を計算し，残差二乗和 $J \equiv \sum_i^n \left(y_i - \hat{y}_i \right)^2$ を求める．次に，(5)式の標本標準偏差 s に相当する量を次のように求める．

$$s = \sqrt{\frac{J}{n-m}} \tag{24}$$

式中の $n - m$ はデータの数 n と求めるパラメーターc_jの数 m の差で，<u>自由度</u>と呼ばれる．S の値を使って次式でパラメーターの<u>分散行列</u> Σ^c を求める．

$$\Sigma^c = s^2 \left(A^T A \right)^{-1} \tag{25}$$

Σ^c は m 行 m 列の対称行列になる．その対角要素，$\Sigma^c_{1,\,1}$, $\Sigma^c_{2,\,2}$, …, $\Sigma^c_{m,\,m}$, をパラメーターc_m の<u>分散</u>と呼ぶ．それぞれの対角項の平方根，$\sqrt{\Sigma^c_{1,1}}$, $\sqrt{\Sigma^c_{2,2}}$, …, $\sqrt{\Sigma^c_{m,m}}$, が，パラメーター,

$c_1, c_2, \ldots, c_m$, の標準誤差である．これは区間推定法の所で述べた $s/\sqrt{N}$ に相当する量である．

分散行列 Σ^c には非対角要素 $\Sigma^c{}_{jk}, (j \neq k)$ も存在する．これを使って次のように，パラメーター c_j と c_k の間の<u>相関係数</u> $\rho_{j,k}$ を定義する．

$$\rho_{j,k} \equiv \frac{\Sigma^c_{j,k}}{\sqrt{\Sigma^c_{j,j}} \cdot \sqrt{\Sigma^c_{k,k}}} \ , \quad (j \neq k) \tag{26}$$

相関係数 $\rho_{j,k}$ の取り得る値の範囲は $-1 \leq \rho_{j,k} \leq +1$ である．あるパラメーター c_j と c_k の間の相関係数 $\rho_{j,k}$ の値が $+1$ や -1 に近い場合は，その二つのパラメーターは同時には決定しにくい，と言うことを示している．

最後に，最小二乗法で求めたパラメーター，$c_1, c_2, \ldots, c_m$, を用いて別の物理量 y を計算した時の，y の標準誤差の求め方について述べる．前述の誤差伝搬の節では，互いに独立な測定で得られた $x_1, x_2, \ldots, x_n$ という物理量から物理量 y を計算する場合について説明したが，この時は元になる $x_1, x_2, \ldots, x_n$ の間には相関は無かった．今回は，互いに相関のあるパラメーターの組み，$c_1, c_2, \ldots, c_m$, から y を計算する場合である．物理量 y が次の関数であらわされるとする．

$$y = g\,(c_1, c_2, \ldots, c_m) \tag{27}$$

ここで，次のベクトル $\boldsymbol{G}$ を定義する．

$$\boldsymbol{G} = \begin{pmatrix} \partial g/\partial c_1 \\ \partial g/\partial c_2 \\ \vdots \\ \partial g/\partial c_m \end{pmatrix} \tag{28}$$

この時，$c_1, c_2, \ldots, c_m$, の誤差伝搬によってもたらされる y の標準誤差 Δy は，次の式で計算される．

$$\Delta y = \sqrt{\boldsymbol{G}^T \Sigma^c \boldsymbol{G}} \tag{29}$$

この式で求められた Δy には，$c_1, c_2, \ldots, c_m$, の各要素の間の相関による寄与も取り入れられている．