Table of Contents

線形最小2乗法

(LeastSquareFit)

file:/Users/bob/Github/TeamNishitani/jupyter_num_calc/leastsquarefit
https://github.com/daddygongon/jupyter_num_calc/tree/master/notebooks_p

pythonによる最小2乗法

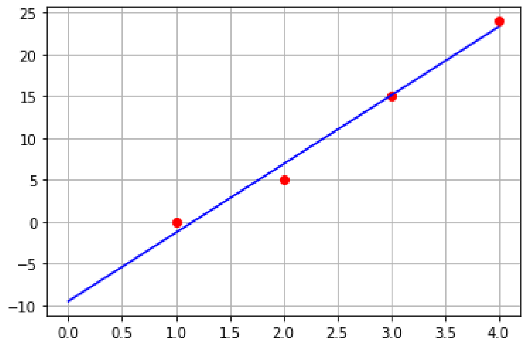
前章では，データに多項式を完全にフィットする補間についてみた．今回は，近似的にフィットする最小二乗法について詳しくみていく．図のようなデータに直線をフィットする場合を考えよう．

python code

x = [1,2,3,4], y=[0,5,15,24]に$y = a0 + a1\,x$をフィットする例を考える． pythonのcodeは以下の通り．

In [1]:
```
%matplotlib inline
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.optimize import curve_fit

def f(x, a0, a1): #, a2):
    return a0 + a1*x #+ a2*x**2

xdata = np.array([1,2,3,4])
ydata = np.array([0,5,15,24])
plt.plot(xdata,ydata, 'o', color='r')

params, cov = curve_fit(f, xdata, ydata)
print(params)

x =np.linspace(0,4,20)
y = f(x,params[0],params[1])  #,params[2])
plt.plot(x,y, color='b')

plt.grid()
plt.show()
```

```
[-9.5  8.2]
```



結果， a0=-9.5, a1=8.2にfitされることがわかる．

最小2乗法の原理

もっとも簡単な例で原理を解説する．近似関数として，

$$F(x) = a_0 + a_1\,x$$

という直線近似を考える．もっともらしい関数はN点の測定データとの差$d_i = F(x_i) - y_i$を最小にすればよさそうであるが，これはプラスマイナスですぐに消えて不定になる．そこで，

$$\chi^2 = \sum_i^N d_i^2 = \sum_i^N (a_0 + a_1\,x_i - y_i)^2$$

という関数を考える．このχ^2(カイ二乗)関数が，a_0, a_1をパラメータとして変えた時に最小となるa_0, a_1を求める．これは，それらの微分がそれぞれ0となる場合である．これはχ^2の和$\sum$(sum)の中身を展開し，

$$\chi^2 =$$

a_0, a_1でそれぞれ微分すれば

$\frac{\partial}{\partial a_0}\chi^2 =$

$\frac{\partial}{\partial a_1}\chi^2 =$

というa_0, a_1を未知変数とする2元の連立方程式が得られる．これは前に説明した通り逆行列で解くことができる．

χ^2の極小値から(2変数の例)

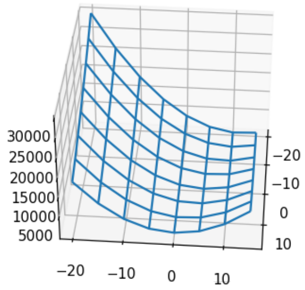
先ほどの例をもとに何をしているか別の角度からみる． データを関数に入れてsumをとると次のような関数が得られる．

In [2]:
```
%matplotlib notebook
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
from sympy import *

a0, a1 = symbols('a0, a1')
def func(x):
   return a0+a1*x

def z_surf(xx,yy):
   sum = 0
   for i in range(0,4):
      tmp = xx[i] - yy[i]
      sum = sum + tmp*tmp
   return sum

x1 = np.array([1,2,3,4])
y1 = np.array([0,5,15,24])
eq = z_surf(func(x1),y1)
print(eq)
print(expand(eq))
```

```
(a0 + a1)**2 + (a0 + 2*a1 - 5)**2 + (a0 + 3*a1 - 15)**2 + (a0 + 4*a1 - 24)**2
4*a0**2 + 20*a0*a1 - 88*a0 + 30*a1**2 - 302*a1 + 826
```

これはa0,a1を変数とする関数となっている． データ点(xi,yi)はすでに数値を持っており，未知なのはa0,a1である． そうすると$\chi^2(a0, a1)$，つまりa0,a1をパラメータとして，χ^2の値をz軸とする3次元関数とみなすことができて，それをplotすると次の通り．

In [13]:
```
%matplotlib notebook
def f(a0, a1):
   return 4*a0**2 + 20*a0*a1 - 88.0*a0 + 30*a1**2 - 302.0*a1 + 826.0

a0 = np.arange(-20, 20, 5)
a1 = np.arange(-20, 20, 5)
A0, A1 = np.meshgrid(a0, a1)
Z1 = f(A0, A1)

fig = plt.figure()
ax = fig.add_subplot(111, projection="3d")
ax.plot_wireframe(A0, A1, Z1)

plt.show()
```



a0=-9.5, a1=8.2あたりに最小値があるはずですが．．．見にくいよね． こういうのをsteepな関数って言いますが，それが後で述べる特異値分解を使わなければいけない理由です． 値が微妙でなければ，微分して0において，連立方程式とみなして解くことができます． それが，上の「最小2乗法の原理」で述べた解法になります．

正規方程式(Normal Equations)による解

より一般的な場合の最小二乗法の解法を説明する．先程の例では1次の多項式を近似関数とした．これをより一般的な関数，例えば，$\sin, \cos, \tan, \exp, \sinh$などとする．これを線形(linear)につないだ関数を

$$F(x) = a_0 \sin(x) + a_1 \cos(x) + a_2 \exp(-x) + a_3 \sinh(x) + \cdots = \sum_{k=1}^{M} a_k X_k(x)$$

ととる．実際には，$X_k(x)$はモデルや，多項式の高次項など論拠のある関数列をとる．これらを基底関数(base functions)と呼ぶ． ここで線形といっているのは，パラメータa_kについて線形という意味である．このような，より一般的な基底関数を使っても，χ^2関数は

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} (F(x_i) - y_i)^2 = \sum_{i=1}^{N} \left(\sum_{k=1}^{M} a_k X_k(x_i) - y_i \right)^2$$

と求めることができる． この関数を，a_kを変数とする関数とみなす． この関数が最小値を取るのは， χ^2をM個のa_kで偏微分した式がすべて0となる場合である． これを実際に求めてみると，

$$\sum_{i=1}^{N}\left(\sum_{j=1}^{M} a_j X_j(x_i) - y_i\right) X_k(x_i) = 0$$

となる．ここで，$k = 1..M$のM個の連立方程式である．この連立方程式を最小二乗法の正規方程式(normal equations)と呼ぶ．

上記の記法のままでは，ややこしいので，行列形式で書き直す．$N \times M$で，各要素を

$$A_{ij} = X_j(x_i)$$

とする行列Aを導入する．この行列は，

$$A = \begin{bmatrix} X_1(x_1) & X_2(x_1) & \cdots & X_M(x_1) \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ X_1(x_N) & X_2(x_N) & \cdots & X_M(x_N) \end{bmatrix}$$

となる．これをデザイン行列と呼ぶ．すると先程の正規方程式は，

$$A^t . A . a = A^t . y$$

で与えられる．A^tは行列Aの転置(transpose)

$$A^t = A^t_{ij} = A_{ji}$$

を意味し，得られた行列は，$M \times N$である．a, yはそれぞれ，

$$a = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_M \end{bmatrix}, y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix}$$

である．

$M = 3, N = 25$として行列の次元だけで表現すると，

$$\begin{bmatrix} & & \cdots & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ & & \cdots & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} & \vdots & \\ & \vdots & \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ & \vdots & \\ & \vdots & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} & & \cdots & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ & & \cdots & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix}$$

となる．これは少しの計算で3×3の逆行列を解く問題に変形できる．

python codeによる具体例

4点のデータに対して，2次関数つまり3個のパラメータでfitする． その場合，デザイン行列は4行3列になる．

In [4]:

```python
import numpy as np
from pprint import pprint
import scipy.linalg as linalg

xdata=np.array([1,2,3,4])
ydata=np.array([0,5,15,24])

def ff(x,i):
    return x**i

Av = np.zeros([4,3])
for i in range(0,3):
    for j in range(0,4):
        Av[j][i]=ff(xdata[j],i)

pprint(Av)

Ai = linalg.inv(np.dot(np.transpose(Av),Av))
b = np.dot(np.transpose(Av),ydata)
np.dot(Ai,b)
```

```
array([[ 1.,  1.,  1.],
       [ 1.,  2.,  4.],
       [ 1.,  3.,  9.],
       [ 1.,  4., 16.]])
```

Out[4]:

```
array([-4.5,  3.2,  1. ])
```

特異値分解(Singular Value Decomposition)による解

正規方程式を解くときには，少し注意が必要である．単純な逆行列による解法では，間違った答えに行き着く可能性が高い．より信頼性の高い方法では，特異値分解を用いる．正規方程式での共分散行列,特異値分解の導出や標準偏差との関係はNumRecipeを参照せよ．

In [5]:

```python
import numpy as np
from pprint import pprint
import scipy.linalg as linalg

xdata=np.array([1,2,3,4])
ydata=np.array([0,5,15,24])

#def f(x,a1,a2,a3):
#    return a1+a2*x+a3*x**2
def ff(x,i):
    return x**i

Av = np.zeros([4,3])
for i in range(0,3):
    for j in range(0,4):
        Av[j][i]=ff(xdata[j],i)
m,n = Av.shape
pprint(Av)

U, s, Vs = linalg.svd(Av)
pprint(s)
S = linalg.diagsvd(s,m,n)
```

```
pprint(S)
iS = np.zeros([3,4])
for i in range(0,3):
    iS[i][i] = 1.0/s[i]
print(iS)
left = np.dot(np.transpose(Vs),iS)
right= np.dot(np.transpose(U),ydata)
np.dot(left,right)
#print(right)
```

```
array([[ 1.,  1.,  1.],
       [ 1.,  2.,  4.],
       [ 1.,  3.,  9.],
       [ 1.,  4., 16.]])
array([19.62136402,  1.71206987,  0.26625288])
array([[19.62136402,  0.        ,  0.        ],
       [ 0.        ,  1.71206987,  0.        ],
       [ 0.        ,  0.        ,  0.26625288],
       [ 0.        ,  0.        ,  0.        ]])
[[0.05096486 0.         0.         0.        ]
 [0.         0.58408831 0.         0.        ]
 [0.         0.         3.75582793 0.        ]]
```

Out[5]:

```
array([-4.5,  3.2,  1. ])
```

scipy.linalg.lstsq

scipy.linalg.lstsqによるcurve fitについて紹介しておく. あらかじめ，デザイン行列Aを作っておいて，これを

$$Ax=b$$

とみなした場合のxについて解く.

In [6]:

```
import numpy as np
from pprint import pprint
import scipy.linalg as linalg

xdata=np.array([1,2,3,4])
ydata=np.array([0,5,15,24])

def ff(x,i):
    return x**i

Av = np.zeros([4,3])
for i in range(0,3):
    for j in range(0,4):
        Av[j][i]=ff(xdata[j],i)
print(Av)

c, resid, rank, sigma = linalg.lstsq(Av, ydata)
print(c,resid,rank,sigma)
```

```
[[ 1.  1.  1.]
 [ 1.  2.  4.]
 [ 1.  3.  9.]
 [ 1.  4. 16.]]
[-4.5  3.2  1. ] 1.7999999999999976 3 [19.62136402  1.71206987  0.26625288]
```

正規方程式によるのも．．．

lstsqは~~正規方程式~~によるのと同じかな．SVD!!

In [7]:

```
Ai = linalg.inv(np.dot(np.transpose(Av),Av))
b = np.dot(np.transpose(Av), ydata)
np.dot(Ai,b)
```

Out[7]:

```
array([-4.5,  3.2,  1. ])
```

2次元曲面へのフィット

先程の一般化をより発展させると，3次元(x_i, y_i, z_i)で提供されるデータへの，2次元平面でのフィットも可能となる．2次元の単純な曲面は，方程式を使って，

$$F(x,y) = a_1 + a_2\,x + a_3\,y + a_4\,xy + a_5\,x^2 + a_6\,y^2$$

となる．デザイン行列のi行目の要素は，

$$[1,\ x_i,\ y_i,\ x_i\,y_i,\ x_i^2,\ y_i^2]$$

として，それぞれ求める．このデータの変換の様子をpythonスクリプトで詳しく示した．後は，通常の正規方程式を解くようにすれば，このデータを近似する曲面を定めるパラメータ$a_1, a_2, \cdots, a_6$が求まる．最小二乗法はパラメータa_kについて線形であればよい．

具体例

実際のデータ解析での例．データの座標をx,y,zで用意して，scipy.linalgのlinalg.lstsqでfitしている． 正規方程式による解法，つまり逆行列で求めた値と一致していることを確認してください．

In [8]:

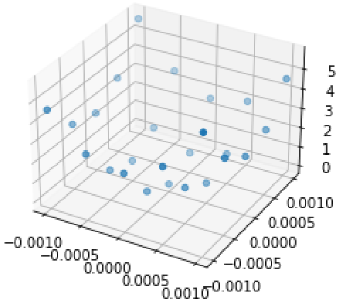
```
import numpy as np
z = np.array([0.000046079702088, 0.000029479057275,
  0.000025769637830, 0.000034951410953, 0.000057024385455, 0.000029485453808
  0.000011519913869, 0.000006442404299, 0.000014252898382, 0.000034951410953
  0.000025769637773, 0.000006442404242, 0.000000000000057, 0.000006442404242
  0.000025769637773, 0.000034932221524, 0.000014246501905, 0.000006442404299
  0.000011519913926, 0.000029479057332, 0.000056973214100, 0.000034932221467
  0.000025769637773, 0.000029485453808, 0.000046079702031])
x = []
y = []
for i in range(-2,3):
    for j in range(-2,3):
        x.append(i*0.0005)
        y.append(j*0.0005)
print(x)
print(y)
```

```
[-0.001, -0.001, -0.001, -0.001, -0.001, -0.0005, -0.0005, -0.0005, -0.0005, -0.0005, 0.0, 0.
0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0005, 0.0005, 0.0005, 0.0005, 0.0005, 0.001, 0.001, 0.001, 0.001, 0.001]
[-0.001, -0.0005, 0.0, 0.0005, 0.001, -0.001, -0.0005, 0.0, 0.0005, 0.001, -0.001, -0.0005,
0.0, 0.0005, 0.001, -0.001, -0.0005, 0.0, 0.0005, 0.001, -0.001, -0.0005, 0.0, 0.0005, 0.00
1]
```

In [9]:

```
%matplotlib inline
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
```

```
fig = plt.figure()
ax = fig.add_subplot(111, projection="3d")
ax.scatter(np.array(x),np.array(y),z)

plt.show()
```

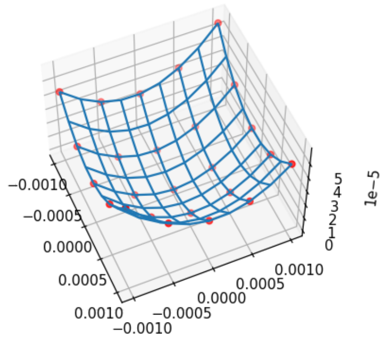


In [10]:
```
from pprint import pprint
import scipy.linalg as linalg

n = z.size
n_j = 6
bb=np.zeros([n])
A=np.zeros([n,n_j])
for i in range(0,n):
    A[i,0]=1
    A[i,1]=x[i]
    A[i,2]=y[i]
    A[i,3]=x[i]*y[i]
    A[i,4]=x[i]**2
    A[i,5]=y[i]**2
    bb[i]=z[i]

c, resid, rank, sigma = linalg.lstsq(A, bb)
pprint(c)

Ai = linalg.inv(np.dot(np.transpose(A),A))
b = np.dot(np.transpose(A),bb)
np.dot(Ai,b)
```

```
array([-9.18521222e-13, -6.39644676e-06,  6.39644220e-06, -5.45955358e+00,
        2.57696284e+01,  2.57696284e+01])
```

Out[10]:
```
array([-9.18525713e-13, -6.39644676e-06,  6.39644220e-06, -5.45955358e+00,
        2.57696284e+01,  2.57696284e+01])
```

In [11]:
```
%matplotlib notebook
# for jupyter notebook
# %matplotlib inline # for vscode


def z_surf(xx,yy):
    val = c[0] + c[1]*xx + c[2]*yy
    val += c[3]*xx*yy + c[4]*xx**2
    val += c[5]*yy**2
    return val

x1 = np.arange(-0.001, 0.00125, 0.00025)
y1 = np.arange(-0.001, 0.00125, 0.00025)
X, Y = np.meshgrid(x1, y1)
Z1 = z_surf(X,Y)

fig = plt.figure()
ax = fig.add_subplot(111, projection="3d")
ax.scatter(np.array(x),np.array(y),z, color='r')
ax.plot_wireframe(X,Y,Z1)

plt.show()
```



課題

1次元の線形最小二乗法

次の4点のデータを$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$で近似せよ(2006年度期末試験).

```
xdata = np.array([1,2,3,4])
ydata = np.array([1,3,4,10])
```

2次元の最小二乗フィット

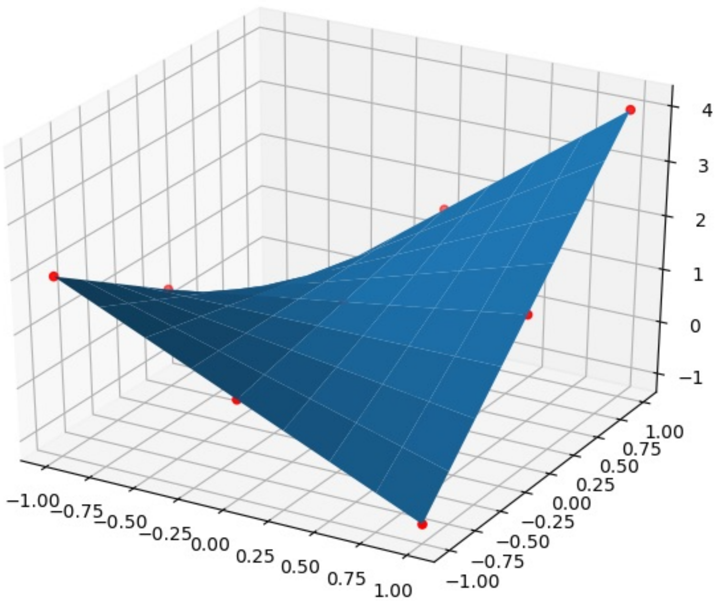
以下のデータを

$$f(x, y) = a_0 + a_1 x + a_2 y + a_3 xy$$

で近似せよ

```
 x,  y,  z
-1, -1,  2.00000
-1,  0,  0.50000
-1,  1, -1.00000
 0, -1,  0.50000
 0,  0,  1.00000
 0,  1,  1.50000
 1, -1, -1.00000
 1,  0,  1.50000
 1,  1,  4.00000
```

結果は以下の通り．鞍点になってます．



4
3
2
1
0
−1
1.00
0.75
0.50
0.25
0.00
−0.25
−0.50
−0.75
−1.00
−1.00
−0.75
−0.50
−0.25
0.00
0.25
0.50
0.75
1.00

In [ ]: