数値計算：線形最小二乗法

関西学院大学・理工学部・情報科学科　西谷滋人

2006.11.24

1　最小二乗法の原理

前回の授業では，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．

関数は，

$$F(x) = a_0 + a_1 x \tag{1}$$

とする．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，

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

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，

$$\boxed{\qquad\qquad\qquad\qquad} \tag{3}$$

a_0, a_1 でそれぞれ微分すれば

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_0} = \boxed{\qquad\qquad\qquad\qquad} \tag{4}$$

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_1} = \boxed{\qquad\qquad\qquad\qquad} \tag{5}$$

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，LU 分解などで解くことができる．

2 正規方程式による解

より一般的な場合の最小二乗法の解放を説明する．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

$$F(x) = a_0 \sin(x) + a_1 \cos(x) + a_2 \exp(-x) + a_3 \sinh(x) + \cdots = \sum_{k=1}^{M} a_k X_k(x) \tag{6}$$

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．この応用を次節で取り上げる．

このより一般的な基底関数を使っても，χ^2 関数は

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} (y_i - F(x_i))^2 = \sum_{i=1}^{N} (y_i - \sum_{k=1}^{M} a_k X_k(x_i))^2 \tag{7}$$

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．これは

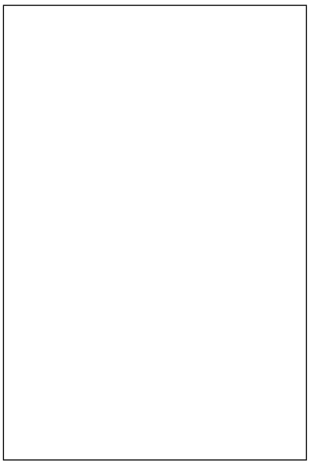
$$0 = \sum_{i=1}^{N} \left\{ y_i - \sum_{j=1}^{M} a_j X_j(x) \right\} X_k(x_i) \tag{8}$$

ここで，$k = 1, \ldots, M$ 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

$$A_{ij} = X_j(x_i) \tag{9}$$

とする行列 A を導入する．この行列は，

$A =$  (10)

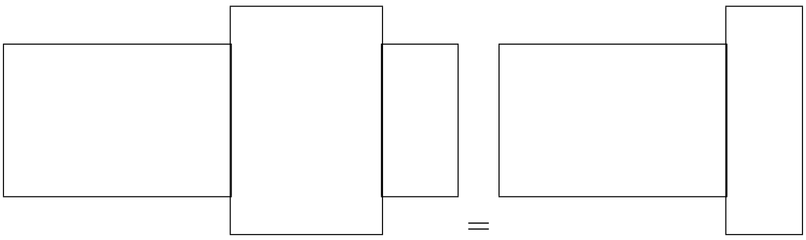
となる．これをデザイン行列と呼ぶ．すると先程の正規方程式は，

$$A^T \cdot A \cdot a = A^T \cdot b \tag{11}$$

で与えられる．A^T は行列 A の転置 (transpose) を意味し，得られた行列は，$M \times N$ である．a, b はそれぞれ，

$$a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_M \end{pmatrix} \quad , \quad b = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} \tag{12}$$

である．行列の次元だけで表現すると，

 (13)

となる．

3　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，

$$F(x, y) = a_1 + a_2 x + a_3 y + a_4 xy + a_5 x^2 + a_6 y^2 \tag{14}$$

となる．デザイン行列の i 行目の要素は,

$$[1\, x_i\, y_i\, x_i y_i\, {x_i}^2\, {y_i}^2] \tag{15}$$

として，それぞれ求める．このデータの変換の様子をMaple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 $a_1, \cdots, a_6$ 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.

課題

1. 1次元の線形最小二乗法
   次の4点のデータを $y = a_1 + a_2 x + a_3 x^2$ で近似せよ.

```
X:=[0,1,2,3];
Y:=[1,3,4,10];
```

2. 2次元の最小二乗フィット
   以下のデータを $f(x, y) = a_1 + a_2 x + a_3 y + a_4 xy$ 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
```