数値計算第13回 最小二乗法

テーマ：　最小二乗法

問題点：　分点(x_d, y_d)が補間多項式の未知数よりも多いとき，多項式をどう求めるか

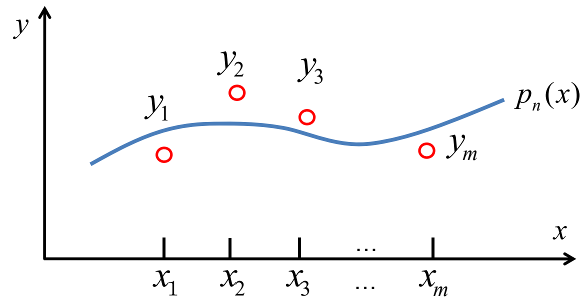
方法：　残差の２ノルムが最小の多項式を求める

$$Ax = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix} = b \quad (m > n)$$

最小二乗近似を使う場面

- 分点数mが多項式の次数nより，大きい場合の近似方法
- 分点(x_d, y_d)と多項式の残差の２ノルムを最小化
  - 最小二乗近似

例. 計測されたm点を近似するn次多項式 $p_n(x)$



多数の実験データから近似曲線を求めるときによく用いる

今回の演習

- 演習13-1　最小二乗近似（ＱＲ分解）
- 演習13-2　最小二乗近似（Matlab）

過剰条件方程式

方程式の数mより未知数$x_1, x_2, \ldots x_n$の数nが小さい

縦長な行列になる

$$Ax = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix} = b \quad (m > n)$$

縦長

過剰条件方程式の最小二乗解

方程式が多く，一般的な解は持たない
そこで下式を最小化する方法で求める

$$F(x) \equiv \|b - Ax\|_2^{\,2}$$

（2ノルムの2乗）

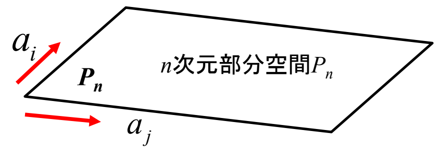
- Fが最小となる x^* ：　最小二乗解
- 解を求める方法：　最小二乗法
- 残差　$r = b - Ax$

教科書85ページ

最小二乗解の幾何学的な意味(1)

- Axは $(a_1, a_2, a_3, \cdots, a_n)$ が線型結合で張るR^mのn次元部分空間P_n　(x, a_nは列ベクトル)

$$y = Ax = (a_1, a_2, a_3, \cdots, a_n)x$$
$$= a_1 x_1 + a_2 x_2 + \cdots + a_n x_n$$



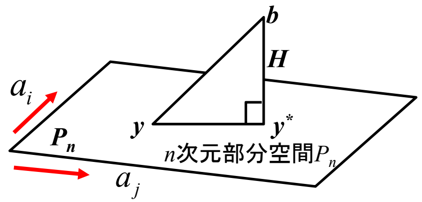
教科書85ページ

最小二乗解の幾何学的な意味(2)

- 直角三角形yy^*bに対し，三平方の定理から下式が成り立つ

$$\|b-y\|_2^{\,2} = \|b-y^*\|_2^{\,2} + \|y-y^*\|_2^{\,2} \ge \underline{\|b-y^*\|_2^{\,2} = \|r^*\|_2^{\,2}}$$

- $b \in R^m$に最も近い$\boldsymbol{P}_n$上の点は垂線の足y^*
- このとき残差は最小値r*となる（最小二乗解）



教科書85ページ

正規方程式の導出

- P_n上の点 $y=Ax$ が垂線の足 y^* となる条件
- 残差 $r=b-Ax$ がP_nの全ベクトルと直交

$$(a_j, b - Ax) = a_j^T(b - Ax) = 0 \quad (1 \le j \le n)$$

- まとめて書くと正規方程式の式(4)となる

$$A^T(b - Ax) = \begin{pmatrix} a_1^T \\ a_2^T \\ \vdots \\ a_n^T \end{pmatrix}(b - Ax) = 0$$

$$A^T(b - Ax) = 0$$

$$A^T A x = A^T b \qquad (4)$$

一般的な最小二乗近似の表現

- 最小二乗近似となる*n-1*次多項式

$y = c_1 x^{n-1} + \ldots + c_{n-1} x^1 + c_n$

ヴァンデルモンド行列と呼ぶ

$$\beta_1 = c_1 \alpha_1^{n-1} + \ldots + c_{n-1}\alpha_1 + c_n$$
$$\beta_2 = c_1 \alpha_2^{n-1} + \ldots + c_{n-1}\alpha_2 + c_n$$
$$\vdots$$
$$\beta_m = c_1 \alpha_m^{n-1} + \ldots + c_{n-1}\alpha_m + c_n$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1^{n-1} & \cdots & \alpha_1^1 & 1 \\ \alpha_2^{n-1} & \ddots & \alpha_2^1 & 1 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \alpha_m^{n-1} & \cdots & \alpha_m^1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$$

過剰条件方程式
(m行n列)

$$b = Ax$$

正規方程式
(n行n列)

$$A^T b = A^T A x$$

最小二乗解の計算方法

教科書89ページ

- 正規方程式の不安定性（数値計算上の）

$$A^T A x = A^T b \qquad (4)$$

（$A^T A$は条件数が大）

- A=QRと分解する計算方法を推奨

（ハウスホルダーQR分解法）

教科書88ページ

$$(QR)^T QRx = (QR)^T b$$
$$R^T Q^T QRx = R^T Q^T b$$
$$R^T Rx = R^T Q^T b$$
$$Rx = Q^T b$$

ハウスホルダー変換で
直交行列Qを計算
（$Q^T Q$=E）
Rは上三角行列

最小二乗近似の直線の計算例

- データに対し最小二乗近似となる直線

$y = c_1 x + c_2$ の係数を求める

xd	1	2	3
yd	1	2	5

$$c_1 \cdot 1 + c_2 = 1$$
$$c_1 \cdot 2 + c_2 = 2$$
$$c_1 \cdot 3 + c_2 = 5$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 5 \end{pmatrix}$$

過剰条件方程式

最小二乗近似の直線の計算例（つづき）

```
%　正規方程式を用いる方法
%　条件数大なので非推奨
A=[1 1;2 1;3 1];
b=[1;2;5];

AtA=A'*A;
Atb=A'*b;
c=AtA¥Atb
c=
   2.0000
  -1.3333
```

```
%　QR分解による方法
%　こちらを推奨
A=[1 1;2 1;3 1];
b=[1;2;5];

[Q,R] = qr(A,0);
z=Q'*b;
c=R¥z;
c=
   2.0000
  -1.3333
```

最小二乗近似関数

$$y_1 = 2x_1 - 1.3333333$$

なお，この例は行列の次元数が小さいので
2つの方法の結果は等しい

演習13-1　最小二乗近似（ＱＲ分解）

- 最小二乗近似プログラムで，グラフを描画する
- データ定義を追加すればプログラムは動作する
- 以下の2種類のデータに対し，一次式($y=c_1x+c_2$)と二次式（$y=c_1x^2+c_2x+c_3$)で近似し，4種のグラフを作成する

xd	1	2	3
yd	1	2	5

xd	1	2	3	1.5	1.8	2.5
yd	1	2	5	2.5	3.0	3.5

演習13-2　 最小二乗近似（Matlab）

- Matlab のpolyfit関数を使用して，下記データの最小二乗近似となる直線を求める

xd	1	2	3
yd	1	2	5

xd	1	2	3	1.5	1.8	2.5
yd	1	2	5	2.5	3.0	3.5

doc polyfitで使用例を参照して作成しなさい

今回の講義のまとめ
最小二乗法

テーマ：　最小二乗法

問題点：　分点(x_l , y_l)が補間多項式の未知数よりも多いとき，多項式をどう求めるか

方法：　残差２ノルム最小の多項式で近似

$$Ax=\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}=b \quad (m>n)$$