数値計算法・数値解析

近似：線形最小二乗法

宮崎大学 工学部

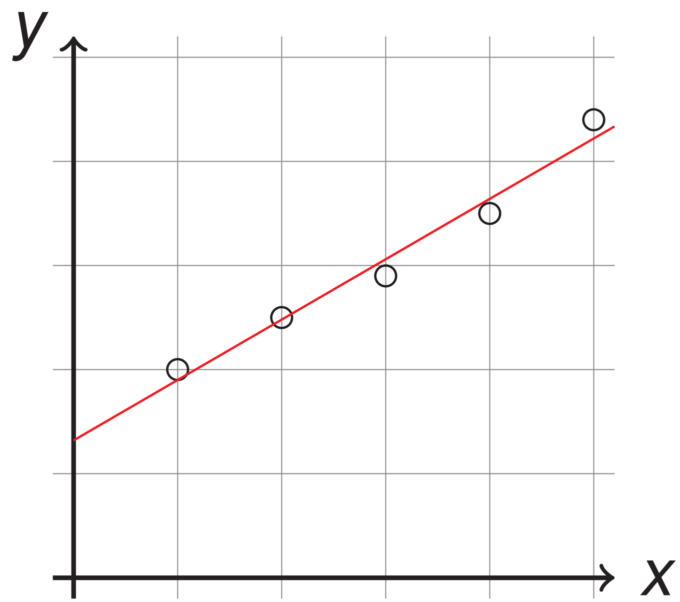
第 8 回

1 次関数の近似

- 誤差を含んだ観測データの組

$$\{(x_i, y_i)|i = 1, \ldots, N\}$$

  が与えられる
- これらのデータを近似する式 $y = ax + b$ を求める



近似式とデータとの二乗誤差の和が最小となるように a, b の値を定める

1 次関数の近似

- 近似式とデータとの二乗誤差の和

$$E = \sum_{i=1}^{N} (ax_i + b - y_i)^2$$

- E は a, b に関する二次関数
- 二次関数の最小値（極値）では，一次微分が 0

$$\frac{\partial E}{\partial a} = 0 \qquad \frac{\partial E}{\partial b} = 0$$

$$\begin{cases} \frac{\partial E}{\partial a} & = 2\sum_{i=1}^{N} x_i(ax_i + b - y_i) & = 0 \\ \frac{\partial E}{\partial b} & = 2\sum_{i=1}^{N} (ax_i + b - y_i) & = 0 \end{cases}$$

a, b に関するこの連立一次方程式を解けばよい

例：１次関数の近似

以下のデータを近似する一次関数を求めよ

x	1.0	2.0	3.0	4.0	5.0
y	2.0	2.5	2.9	3.5	4.4

幾つかの関数の線形結合による近似

$$
\begin{aligned}
y &= w_1 f_1(x) + w_2 f_2(x) + \ldots + w_M f_M(x) \\
&= \sum_{k=1}^{M} w_k f_k(x)
\end{aligned}
$$

- y は w_k に関する一次式（線形）
- 近似式とデータとの二乗誤差の和

$$
E = \sum_{i=1}^{N} \left\{ \left(\sum_{k=1}^{M} w_k f_k(x_i) \right) - y_i \right\}^2
$$

- E は w_k に関する二次関数

幾つかの関数の線形結合による近似

- 二次関数の最小値（極値）では，一次微分が 0

$$\frac{\partial E}{\partial w_j} = 0 \quad j = 1, \ldots, M$$

$$\frac{\partial E}{\partial w_j} = 2 \sum_{i=1}^{N} f_j(x_i) \left\{ \left(\sum_{k=1}^{M} w_k f_k(x_i) \right) - y_i \right\} = 0$$

w_k に関するこの連立一次方程式を解けばよい

幾つかの関数の線形結合による近似

$$\sum_{i=1}^{N} f_j(x_i)\left\{\left(\sum_{k=1}^{M} w_k f_k(x_i)\right) - y_i\right\} = 0 \qquad j = 1, \ldots, M$$

$$\sum_{i=1}^{N}\left\{\left(\sum_{k=1}^{M} f_j(x_i) w_k f_k(x_i)\right) - f_j(x_i) y_i\right\} = 0 \qquad j = 1, \ldots, M$$

$$\sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{M} f_j(x_i) w_k f_k(x_i) - \sum_{i=1}^{N} f_j(x_i) y_i = 0 \qquad j = 1, \ldots, M$$

$$\sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{M} f_j(x_i) f_k(x_i) w_k = \sum_{i=1}^{N} f_j(x_i) y_i \qquad j = 1, \ldots, M$$

近似：線形最小二乗法

幾つかの関数の線形結合による近似

$$\sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{M} f_j(x_i) f_k(x_i) w_k = \sum_{i=1}^{N} f_j(x_i) y_i \qquad j = 1, \ldots, M$$

$$\begin{aligned} F &= \{f_j(x_i)\} = \{f_{ij}\} \\ W &= (w_1, w_2, \ldots, w_M) \\ Y &= (y_1, y_2, \ldots, y_N) \end{aligned}$$

とおくと

$$\begin{pmatrix} f_{11} & f_{21} & \cdots & f_{N1} \\ f_{12} & f_{22} & \cdots & f_{N2} \\ \cdots & & & \\ f_{1M} & f_{2M} & \cdots & f_{NM} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_{11} & f_{12} & \cdots & f_{1M} \\ f_{21} & f_{22} & \cdots & f_{2M} \\ \cdots & & & \\ f_{N1} & f_{N2} & \cdots & f_{NM} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ . \\ w_M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{11} & f_{21} & \cdots & f_{N1} \\ f_{12} & f_{22} & \cdots & f_{N2} \\ \cdots & & & \\ f_{1M} & f_{2M} & \cdots & f_{NM} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ . \\ y_N \end{pmatrix}$$

近似：線形最小二乗法

幾つかの関数の線形結合による近似

$$\begin{pmatrix} f_{11} & f_{21} & \dots & f_{N1} \\ f_{12} & f_{22} & \dots & f_{N2} \\ \dots & & & \\ f_{1M} & f_{2M} & \dots & f_{NM} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_{11} & f_{12} & \dots & f_{1M} \\ f_{21} & f_{22} & \dots & f_{2M} \\ \dots & & & \\ f_{N1} & f_{N2} & \dots & f_{NM} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \dots \\ w_M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{11} & f_{21} & \dots & f_{N1} \\ f_{12} & f_{22} & \dots & f_{N2} \\ \dots & & & \\ f_{1M} & f_{2M} & \dots & f_{NM} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_N \end{pmatrix}$$

$$F^T F W = F^T Y$$

$$\begin{aligned} A &:= F^T F \\ x &:= W \\ b &:= F^T Y \end{aligned}$$

とみると，$Ax = b$ の形の連立一次方程式．
これを解けば，係数 w_k が求まる．

近似：線形最小二乗法（まとめ）

データ $\{(x_i, y_i) | i = 1 \dots N\}$, 関数群 $\{f_k(x) | k = 1 \dots M\}$ が与えられた時，データを

$$y = \sum_{k=1}^{M} w_k f_k(x)$$

により最小二乗近似する係数 w_k は，連立方程式

$$F^T F W = F^T Y$$

の解，W である．ただし，

$$\begin{aligned} F &= \{f_{ij} = f_j(x_i)\} &:& \quad \text{N 行 M 列行列} \\ W &= (w_1, \dots, w_M) &:& \quad \text{M 次元ベクトル} \\ Y &= (y_1, \dots, y_N) &:& \quad \text{N 次元ベクトル} \end{aligned}$$

例題

以下のデータを最小二乗近似する関数 $y = ax + b/x$ の (a, b) を線形最小二乗法で求めよ

x	0.2	0.5	1.0	2.0	4.0	8.0	10.0
y	12.1	4.9	2.9	2.1	2.1	3.4	4.3

線形最小二乗法のプログラム(1/2)

```
#define TERMS   2
int main(int argc, char *argv[])
{ double px[] = {0.2,0.5,1.0,2.0,4.0,8.0,10.0};
  double py[] = {12.1,4.9,2.9,2.1,2.1,3.4,4.3};
  int    dnum = sizeof(px)/sizeof(px[0]);
  double coeff[TERMS][TERMS+1],fmat[dnum][TERMS];
  for(int j = 0; j < dnum; j++) { // y=ax+b/x
    fmat[j][0] = px[j];               // 第1項
    fmat[j][1] = 1.0/px[j];           // 第2項
  }
  set_coeff(fmat, py, coeff, dnum);
  gauss_jordan(coeff, TERMS);
  for(int i = 0; i < TERMS; i++) {
    printf("w%d␣=␣%.15f\n", i, coeff[i][TERMS]);
  }
  return 0;
}
```

線形最小二乗法のプログラム(2/2)

```
void set_coeff(double fmat[][TERMS], double py[],
                    double coeff[][TERMS+1], int dnum)
{  for(int i = 0; i < TERMS; i++) {
     // F^T F
     for(int j = 0; j < TERMS; j++) {
       coeff[i][j] = 0.0;
       for(int k = 0; k < dnum; k++) {
         coeff[i][j] += fmat[k][i] * fmat[k][j];
     } }
     // F^T Y
     coeff[i][TERMS] = 0.0;
     for(int k = 0; k < dnum; k++) {
       coeff[i][TERMS] += fmat[k][i] * py[k];
}}}
void gauss_jordan(double a[TERMS][TERMS+1], int
size){ ...
```