非線形回帰モデル

いか

April 19, 2023

多変量解析ゼミ

目次

回帰モデル

回帰モデル

説明変数 x_i，目的変数 y_i，誤差項 ε_i の回帰モデル

$$y_i = u(x_i; \theta) + \varepsilon_i \quad (i = 1, 2, \ldots, n)$$

について考える．$u(\textvisiblespace; \theta)$ はパラメータ θ に依存する関数．

Example

多項式回帰モデル $u(x; \boldsymbol{\beta}) = \beta_0 + \beta_1 x + \cdots + \beta_p x^p$

成長曲線モデル $u(x; \beta_0, \beta_1) = \beta_0 \mathrm{e}^{\beta_1 x}$

基底展開法

基底展開法

$u(\textvisiblespace; \boldsymbol{w})$ を基底関数 $\phi_0, \phi_1, \ldots, \phi_m$（$\phi_0 \equiv 1$）の線形結合で

$$u(x; \boldsymbol{w}) = \sum_{i=0}^{m} w_i \phi_i(x) \quad \left(\boldsymbol{w} = (w_0 \quad \cdots \quad w_m)^\mathsf{T}\right)$$

とおく（基底関数展開）. $\boldsymbol{\phi}(x) = (\phi_0(x) \quad \cdots \quad \phi_m(x))^\mathsf{T}$ とおくと

$$u(x; \boldsymbol{w}) = \boldsymbol{w}^\mathsf{T} \boldsymbol{\phi}(x)$$

とも書ける.

基底展開法

Example

多項式 $\phi_i(x) = x^i$

ガウシアン $\phi_i(x) = \mathrm{e}^{-|x-\mu_i|^2/(2h_i^2)}$

スプライン 3 次スプラインや B-スプラインなど（後述）

基底展開法

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{\phi}(x_1) + \varepsilon_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{\phi}(x_n) + \varepsilon_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\phi}^\top(x_1) \\ \vdots \\ \boldsymbol{\phi}^\top(x_n) \end{pmatrix} \boldsymbol{w} + \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}$$

だから

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{\Phi} \boldsymbol{w} + \boldsymbol{\varepsilon}$$

である．ただし $\boldsymbol{y}$，$\boldsymbol{\Phi}$，$\boldsymbol{\varepsilon}$ は以下の通り．

$$\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\Phi} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\phi}^\top(x_1) \\ \vdots \\ \boldsymbol{\phi}^\top(x_n) \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}$$

Problem
回帰モデル $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{w} + \boldsymbol{\varepsilon}$ から $\boldsymbol{w}$ を推定する方法は？

Solution

1. 最小 2 乗法
2. 最尤法

基底展開法 > 最小 2 乗法

$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{\Phi w} + \boldsymbol{\varepsilon}$ より，ε_i の 2 乗和は

$$\mathrm{RSS} := \|\boldsymbol{\varepsilon}\|_2^2 = \|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\Phi w}\|_2^2 \quad \left(\|\boldsymbol{w}\|_2 := \sqrt{\sum |w_i|^2}\right)$$

である．RSS を最小にするには

$$\boldsymbol{\Phi}^\top \boldsymbol{\Phi w} = \boldsymbol{\Phi}^\top \boldsymbol{y} \quad \text{（正規方程式）}$$

を解けば OK．$\boldsymbol{\Phi}^\top \boldsymbol{\Phi}$ が正則なら解（推定量）は一意で

$$\hat{\boldsymbol{w}} = (\boldsymbol{\Phi}^\top \boldsymbol{\Phi})^{-1} \boldsymbol{\Phi}^\top \boldsymbol{y}$$

と書ける．

$\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots, \varepsilon_n \sim \text{i.i.d. } N(0, \sigma^2)$，つまり $\boldsymbol{\varepsilon} \sim N_n(\mathbf{0}, \sigma^2 \boldsymbol{I})$ であれば

$$f(\boldsymbol{y} \mid \boldsymbol{w}) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{n/2}} \exp\left(-\frac{\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{w}\|_2^2}{2\sigma^2}\right),$$

$$\ln L(\boldsymbol{w}) = \ln f(\boldsymbol{y} \mid \boldsymbol{w}) = -\frac{\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{w}\|_2^2}{2\sigma^2} - \frac{n}{2} \ln(2\pi\sigma^2)$$

だから，$\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots, \varepsilon_n \sim \text{i.i.d. } N(0, \sigma^2)$ なら

最尤推定量＝最小 2 乗推定量

である．

Problem
$\boldsymbol{\Phi}^{\top}\boldsymbol{\Phi}$ を正則にするには，基底関数にどんな条件を課せばよい？

Solution
$\phi_0, \phi_1, \ldots, \phi_m$ が線形独立であればだいたい *OK*.

Definition (線形独立)

$$w_0\phi_0 + w_1\phi_1 + \cdots + w_m\phi_m \equiv 0 \implies \boldsymbol{w} = \boldsymbol{0}$$

Theorem

$$\boldsymbol{\Phi}^{\top}\boldsymbol{\Phi} \text{ が正則} \implies \phi_0, \phi_1, \ldots, \phi_m \text{ が線形独立}$$

Proof.
対偶を示す．$\sum w_i \phi_i \equiv 0$ となる $\boldsymbol{w} \neq \boldsymbol{0}$ があると仮定する．このとき，$\hat{\boldsymbol{w}}$ が正規方程式の解であれば

$$\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{w} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\phi}^\top(x_1) \\ \vdots \\ \boldsymbol{\phi}^\top(x_n) \end{pmatrix} \boldsymbol{w} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{\phi}(x_1) \\ \vdots \\ \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{\phi}(x_n) \end{pmatrix} = \boldsymbol{0},$$

$$\boldsymbol{\Phi}^\top \boldsymbol{\Phi}(\hat{\boldsymbol{w}} + \boldsymbol{w}) = \boldsymbol{\Phi}^\top \boldsymbol{\Phi}\hat{\boldsymbol{w}} + \boldsymbol{\Phi}^\top(\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{w}) = \boldsymbol{\Phi}^\top \boldsymbol{y}$$

だから，$\hat{\boldsymbol{w}} + \boldsymbol{w}$ も正規方程式の解である．よって，正規方程式の係数行列 $\boldsymbol{\Phi}^\top \boldsymbol{\Phi}$ は正則でない． □

その他のモデル

$\boldsymbol{x}_i = (x_{i\,1} \quad \cdots \quad x_{i\,p})^\mathsf{T}$ を説明変数とする.

Definition (加法モデル)

$$u(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\beta}) = \sum_{j=1}^{p} u_j(x_j;\boldsymbol{w}_j), \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{w}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{w}_p \end{pmatrix}$$

$u_j(x; \boldsymbol{w}_j) = \boldsymbol{w}_j^\top \boldsymbol{\phi}_j(x)$ を各 $u_j(\_; \boldsymbol{w}_j)$ の基底関数展開とすると

$$u(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\beta}) = \sum_{j=1}^{p} \boldsymbol{\phi}_j^\top(x_j)\boldsymbol{w}_j = (\boldsymbol{\phi}_1^\top(x_1) \quad \cdots \quad \boldsymbol{\phi}_p^\top(x_p))\boldsymbol{\beta}$$

だから，加法モデルは次のように書き直せる．

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}, \quad \boldsymbol{\Phi} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\phi}_1^\top(x_{1\,1}) & \cdots & \boldsymbol{\phi}_p^\top(x_{1\,p}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{\phi}_1^\top(x_{n\,1}) & \cdots & \boldsymbol{\phi}_p^\top(x_{n\,p}) \end{pmatrix}$$

式の形が基底展開法と同じなので，同様に $\boldsymbol{\beta}$ を推定できる．

$\boldsymbol{x}_i = (x_{i1} \quad \cdots \quad x_{ip})^\top$ を説明変数とする．

Definition (部分線形モデル)

$$y_i = \underbrace{\beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \cdots + \beta_{p-1} x_{ip-1}}_{\text{線形項}} + \underbrace{u_p(x_{ip})}_{\text{非線形項}} + \varepsilon_i$$

u_p を基底関数展開でモデル化すれば，同様にパラメータを推定できる．

モデル選択

モデル選択

モデルのパラメータを $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1 \quad \cdots \quad \beta_p)^\mathsf{T}$ とする．

Definition (赤池情報量基準)

$$\mathrm{AIC} := -2 \max_{\boldsymbol{\beta}}(\ln L(\boldsymbol{\beta})) + 2p \quad (L\text{: 尤度関数})$$

Theorem
基底関数が m 個で $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots, \varepsilon_n \sim \text{i.i.d. } N(0, \sigma^2)$ なら

$$\begin{aligned}\mathrm{AIC} &= n \ln(2\pi\hat{\sigma}^2) + n + 2(m+2) \\ &\sim n \ln(2\pi\hat{\sigma}^2) + n + 2m \quad (\hat{\sigma}^2\text{: } \sigma^2 \text{ の最尤推定量})\end{aligned}$$

正則化

正則化

Definition (正則化)
関数 $E(\boldsymbol{w})$ の代わりに，正則化項 $\lambda R(\boldsymbol{w})$ を加えた関数

$$E_{\mathrm{reg}}(\boldsymbol{w}) := E(\boldsymbol{w}) + \lambda R(\boldsymbol{w})$$

の値を最小化する．λ は正則化の強さを調節するパラメータ．

Example

- L_0 **正則化** $R(\boldsymbol{w}) = \|\boldsymbol{w}\|_0$（$\|\boldsymbol{w}\|_0 := \#\{i \mid w_i \neq 0\}$）
- L_1 **正則化** $R(\boldsymbol{w}) = \|\boldsymbol{w}\|_1$（$\|\boldsymbol{w}\|_1 := \sum |w_i|$）
- L_2 **正則化** $R(\boldsymbol{w}) = \|\boldsymbol{w}\|_2^2$

正則化

$R(\boldsymbol{w}) = \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{K} \boldsymbol{w}$（$\boldsymbol{K}$: 半正定値行列）とするとどうか？

Definition (半正定値行列)
n 次の実対称行列 $\boldsymbol{K}$ について

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{K} \text{ が半正定値} &\overset{\text{def}}{\iff} \text{すべての } \boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^n \text{ で } \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{K} \boldsymbol{w} \geq 0 \\
&\iff \boldsymbol{K} \text{ の固有値がすべて非負}
\end{aligned}
$$

正則化

$\boldsymbol{K}$ が半正定値行列なら，ある直交行列 $\boldsymbol{Q} = (\boldsymbol{q}_0 \quad \cdots \quad \boldsymbol{q}_m)$ で

$$\boldsymbol{K} = \boldsymbol{Q}\,\mathrm{diag}(\lambda_0, \lambda_1, \ldots, \lambda_m)\boldsymbol{Q}^\top \quad (\lambda_i \geq 0)$$

と書ける．同じことだが

$$\boldsymbol{K} = (\boldsymbol{q}_0 \quad \cdots \quad \boldsymbol{q}_m)\begin{pmatrix} \lambda_0 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_m \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{q}_0^\top \\ \vdots \\ \boldsymbol{q}_m^\top \end{pmatrix} = \sum_{i=0}^{m} \boldsymbol{q}_i(\lambda_i \boldsymbol{q}_i^\top)$$

でもある．

正則化

すると，$\boldsymbol{K} = \sum \boldsymbol{q}_i(\lambda_i \boldsymbol{q}_i^\top)$ より

$$R(\boldsymbol{w}) = \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{K} \boldsymbol{w} = \sum_{i=0}^{m} (\boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{q}_i)(\lambda_i \boldsymbol{q}_i^\top \boldsymbol{w}) = \sum_{i=0}^{m} \lambda_i |\boldsymbol{q}_i^\top \boldsymbol{w}|^2$$

である．

内積の絶対値 $|\boldsymbol{q}_i^\top \boldsymbol{w}|$ は $\boldsymbol{w}$ に含まれる $\boldsymbol{q}_i$ の量だから，各 λ_i は

$\boldsymbol{w}$ が $\boldsymbol{q}_i$ を含むことに対するペナルティの重み

と解釈できる．

正則化

Example

1. $\boldsymbol{K} = \boldsymbol{I}$（$L_2$ 正則化）
2. $\boldsymbol{K} = \boldsymbol{L}^\top \boldsymbol{L}$，ただし

$$\boldsymbol{L} := \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 & & & \\ & 1 & -2 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & -2 & 1 \end{pmatrix}$$

$\boldsymbol{L}$ は 2 階微分作用素の離散化である．2 階微分は曲線のうねりぐあいを表すことを思い出そう．

正則化

$w_i = f(i\Delta t)$（$\Delta t > 0$）のとき，$t = i\Delta t$ とおくと

$$
\begin{aligned}
&w_i - 2w_{i+1} + w_{i+2} \\
&= f(t) - 2f(t + \Delta t) + f(t + 2\Delta t) \\
&= (f(t + 2\Delta t) - f(t + \Delta t)) - (f(t + \Delta t) - f(t)) \\
&\simeq f'(t + \Delta t)\Delta t - f'(t)\Delta t \simeq f''(t)\Delta t^2
\end{aligned}
$$

より，$R(\boldsymbol{w}) = \|\boldsymbol{L}\boldsymbol{w}\|_2^2$ について次の近似式が得られる．

$$
R(\boldsymbol{w}) \simeq \sum |f''(i\Delta t)|^2 \Delta t^4 \simeq \left(\int |f''(t)|^2 \, \mathrm{d}t \right) \Delta t^3
$$

正則化最小 2 乗法では，RSS に正則化項 $\lambda R(\boldsymbol{w})$ を加えた

$$S_\lambda(\boldsymbol{w}) := \mathrm{RSS} + \lambda R(\boldsymbol{w}) = \|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{w}\|_2^2 + \lambda R(\boldsymbol{w})$$

を最小化する．

Example

Lasso $R(\boldsymbol{w}) = \|\boldsymbol{w}\|_1$（$L_1$ 正則化）

Ridge $R(\boldsymbol{w}) = \|\boldsymbol{w}\|_2^2$（$L_2$ 正則化）

$R(\boldsymbol{w}) = \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{K} \boldsymbol{w}$（$\boldsymbol{K}$: 半正定値行列）のとき

$$S_\lambda(\boldsymbol{w}) = \|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{w}\|_2^2 + \lambda \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{K} \boldsymbol{w},$$
$$\frac{\partial S_\lambda}{\partial \boldsymbol{w}} = -2\boldsymbol{\Phi}^\top(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{w}) + 2\lambda \boldsymbol{K}\boldsymbol{w}$$

だから

$$\frac{\partial S_\lambda}{\partial \boldsymbol{w}} = \boldsymbol{0} \iff (\boldsymbol{\Phi}^\top \boldsymbol{\Phi} - \lambda \boldsymbol{K})\boldsymbol{w} = \boldsymbol{\Phi}^\top \boldsymbol{y}$$

である．

サマリー

サマリー

- 非線形性をとりこむには基底展開法が便利
- パラメータ推定には最小 2 乗法と最尤法が使えて，ある条件下で 2 つは同値
- 最小値を計算しにくいときは正則化法が有効

スプライン

Theorem
$p_1, q_1, \dot{q}_1, \ddot{q}_1, p_2, q_2$ は定数で，$p_1 \neq p_2$ とする．このとき，以下の条件を満たす 3 次関数 $f(x)$ がただ一つ存在する．

1. $f(p_1) = q_1$，$f(p_2) = q_2$.
2. $\dot{q}_1 = f'(p_1)$，$\ddot{q}_1 = f''(p_1)$.

Proof.
一般性を失わず $p_1 = 0$ とおける．$f(x)$ が存在するのなら，そのマクローリン展開は

$$f(x) = q_1 + \dot{q}_1 x + \frac{\ddot{q}_1}{2} x^2 + \theta x^3 \quad (\theta := f^{(3)}(0)/6)$$

となるはず．すると $q_2 = f(p_2)$ より

$$\theta = \frac{q_2 - (q_1 + \dot{q}_1 p_2 + \ddot{q}_1 p_2^2/2)}{p_2^3}$$

である．この $f(x)$ が条件を満たすことは明らか． □

点列 $\{(p_i, q_i)\} \subseteq \mathbb{R}^2$ は条件 $p_1 < p_2 < \cdots$ を満たすとする．

$\dot{q}_1$ と $\ddot{q}_1$ の値を決めると，2 点 (p_1, q_1) と (p_2, q_2) を通る 3 次関数 $f_1(x)$ が定まる．

$\dot{q}_2 = f_1'(p_2)$，$\ddot{q}_2 = f_1''(p_2)$ とすると，2 点 (p_2, q_2) と (p_3, q_3) を通る 3 次関数 $f_2(x)$ で

$$f_2'(p_2) = \dot{q}_2, \quad f_2''(p_2) = \ddot{q}_2$$

を満たすものが定まる．

さきの手続きをくり返して

$$f(x) := f_1(x)\mathbb{1}_{[p_1,p_2)} + f_2(x)\mathbb{1}_{[p_2,p_3)}(x) + \cdots$$

とすれば，$f(x)$ は各区間 $[p_i, p_{i+1}]$ 上で 3 次関数 $f_i(x)$ に一致する．しかも，構成から 2 階導関数は存在して連続（C^2 級）である．

この $f(x)$ を点列の 3 次スプライン補間という．

$$
\begin{aligned}
f(x) = f_1(x) &+ (f_2(x) - f_1(x))\mathbb{1}_{[p_2,+\infty)}(x) \\
&+ (f_3(x) - f_2(x))\mathbb{1}_{[p_3,+\infty)}(x) \\
&+ \cdots
\end{aligned}
$$

かつ，$f(x)$ が C^2 級なので，$f_i(x)$ と $f_{i-1}(x)$ を $x = p_i$ 周りでテイラー展開すると，異なるのは $(x - p_i)^3$ の係数だけである．よって

$$
f(x) = f_1(x) + \sum_{i \geq 2} \theta_{i-1}(x - p_i)^3 \mathbb{1}_{[p_i,+\infty)}(x)
$$

と書ける．

要するに，$f(x)$ は切断冪関数 $x_+^n := x^n \mathbb{1}_{[0,+\infty)}(x)$ の線形結合で

$$f(x) = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \beta_3 x^3 + \sum_{i \geq 1} \theta_i (x - p_{i+1})_+^3$$

と書ける．

つまり，各 p_i の値があらかじめ決まっていれば，3 次スプライン補間によるフィッティングは基底展開法の一種である．

Definition (B-スプライン関数)

$$B_i^{(0)}(x) := \mathbb{1}_{[t_i, t_{i+1})}(x),$$

$$B_i^{(k)}(x) := \frac{x - t_i}{t_{i+k} - t_i} B_i^{(k-1)}(x) + \frac{t_{i+k+1} - x}{t_{i+k+1} - t_{i+1}} B_{i+1}^{(k-1)}(x).$$

特に $t_{i+1} - t_i = 1$ のとき，$B_i^{(k)}(x)$ は漸化式

$$C_k(x) = \int_{x-1}^{x} C_{k-1}(x)\,\mathrm{d}x, \quad C_0(x) := \mathbb{1}_{[0,1)}(x)$$

で定義されるカーディナル B-スプラインの平行移動で書ける．

B-スプラインは以下の性質を持つ．詳細は Udovičić [3] を参照．

1. $\sum_i B_i^{(k)} \equiv 1$ である．
2. k の値が大きいほど $B_i^{(k)}(x)$ はなめらか．
3. $\{x \in \mathbb{R} \mid C_k(x) \neq 0\}$ は区間で，閉包は $[0, k+1]$ である．

つまり，なめらかさと局在性にトレードオフがある．

曲率

$\gamma\colon\ t \mapsto \boldsymbol{r}(t)$ を座標平面上の曲線とする．

Definition (弧長パラメータ)

$$s(t) := \int \|\dot{\boldsymbol{r}}\|\,\mathrm{d}t, \quad \dot{\boldsymbol{r}} := \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}$$

同じことだが

$$s = \int \sqrt{\mathrm{d}s^2}, \quad \mathrm{d}s^2 := \mathrm{d}\boldsymbol{r}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}, \quad \mathrm{d}\boldsymbol{r} := \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\,\mathrm{d}t$$

でもある．

曲率

$\dot{\boldsymbol{r}}(t)$ と $\dot{\boldsymbol{r}}(t+\Delta t)$ のなす角を $\Delta\theta$ とする．$|\Delta t|$ の値が十分に小さいとき

$$R(t)|\Delta\theta| \simeq |\Delta s|$$

となるような R を曲率半径という．また

$$\kappa := \frac{1}{R}$$

を曲率という．

曲率

$\ddot{\boldsymbol{r}} \coloneqq \mathrm{d}\dot{\boldsymbol{r}}/\mathrm{d}t$ のもとで

$$\dot{\boldsymbol{r}}(t) \times \dot{\boldsymbol{r}}(t+\Delta t) \simeq \dot{\boldsymbol{r}} \times \left(\dot{\boldsymbol{r}} + \frac{\mathrm{d}\dot{\boldsymbol{r}}}{\mathrm{d}t} \Delta t \right) = \dot{\boldsymbol{r}} \times \ddot{\boldsymbol{r}} \Delta t,$$

$$\Delta\theta \simeq \sin\Delta\theta = \frac{\dot{\boldsymbol{r}}(t) \times \dot{\boldsymbol{r}}(t+\Delta t)}{\|\dot{\boldsymbol{r}}(t)\| \|\dot{\boldsymbol{r}}(t+\Delta t)\|} \simeq \frac{\dot{\boldsymbol{r}} \times \ddot{\boldsymbol{r}}}{\|\dot{\boldsymbol{r}}\|^2} \Delta t$$

で，$\Delta t \to \mathrm{d}t$ とすれば

$$\mathrm{d}\theta = \frac{\dot{\boldsymbol{r}} \times \ddot{\boldsymbol{r}}}{\|\dot{\boldsymbol{r}}\|^2} \, \mathrm{d}t$$

となる．

$\mathrm{d}s = \|\dot{\boldsymbol{r}}\|\,\mathrm{d}t$ より

$$\kappa = \frac{1}{R} = \left|\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}s}\right| = \left|\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}s}\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t}\right| = \frac{1}{\|\dot{\boldsymbol{r}}\|}\frac{|\dot{\boldsymbol{r}} \times \ddot{\boldsymbol{r}}|}{\|\dot{\boldsymbol{r}}\|^2}$$

である．

Definition (曲率)

$$\kappa := \frac{1}{R}, \quad R := \frac{|\dot{\boldsymbol{r}} \times \ddot{\boldsymbol{r}}|}{\|\dot{\boldsymbol{r}}\|^3}$$

曲率

近似式

$$(1+\varepsilon)^{\alpha} = 1 + \alpha\varepsilon \quad (\varepsilon \to 0)$$

より，$\boldsymbol{r}(t) = (t, y(t))$，$|\dot{y}| \ll 1$ のとき

$$\kappa = |\ddot{y}|(1+\dot{y}^2)^{-3/2} \approx |\ddot{y}|\left(1 - \frac{3}{2}\dot{y}^2\right)$$

である．よって，$|\dot{y}| \ll 1$ なら $\kappa \approx |\ddot{y}|$ である．

参考文献

- Härdle, Wolfgang; Liang, Hua; Gao, Jiti. Partially Linear Models. Springer-Verlag, 2000, 206p.
- 小西貞則. 多変量解析入門: 線形から非線形へ. 岩波書店, 2022, 306p.
- Udovičić, Zlatko. Splines in Numerical Integration. *Mathematica Balkanica New Series*. 2010, vol. 24, no. 3-4, p. 351-358. `https://eudml.org/doc/11356`, (accessed 2023-04-18).