神戸市立工業高等専門学校
電気工学科／電子工学科
専門科目「数値解析」

2017.5.26

曲線の推定3

山浦 剛（tyamaura@riken.jp）

講義資料ページ

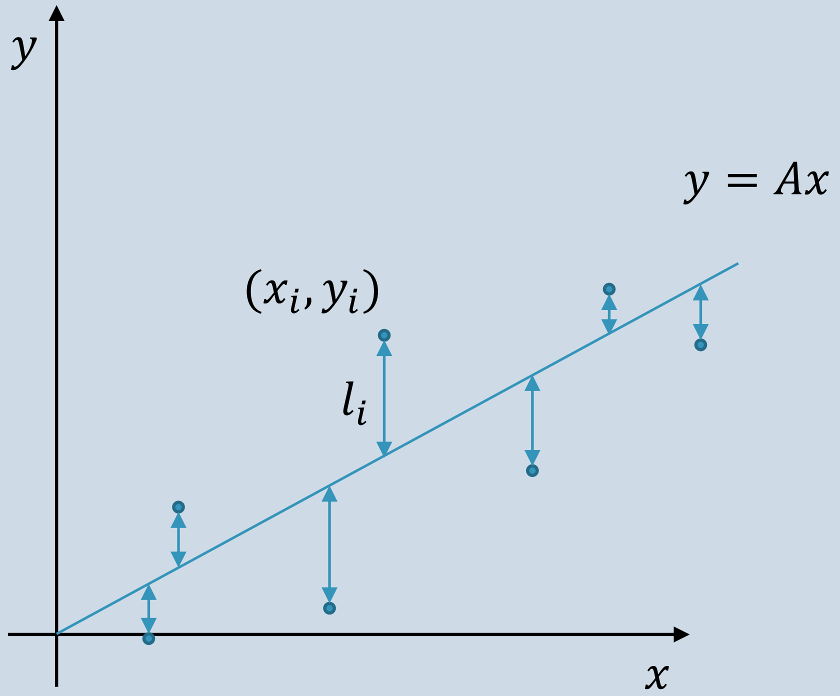
- http://climate.aics.riken.jp/members/yamaura/numerical_analysis.html

実験データからの推定

- 電流I, 電圧V, 抵抗Rの関係（オームの法則）
  - $V = RI$
- 電圧Vを色々変更して電流の値を調べる実験
  - 厳密には直線の上に実験値をプロットできるはず
  - 現実には誤差が含まれるため、そうはならない
- 測定結果から誤差をならした抵抗値（直線の傾き）を推定
  - この推定に使われる方法　⇒　最小2乗法

最小2乗法の原理

- N回の測定で得られた測定データ(x_i, y_i) $(i = 1,2,\ldots,N)$とする
- 理論式$y = Ax$ が成立するとしたとき、残差平方和 $E(A) = \sum_{i=1}^{N}(y_i - Ax_i)^2$ を最小にするような係数A を求める
  - $l_i = (y_i - Ax_i)$ の平方和
- 「各点から直線$y = Ax$ に垂直に下した線分の長さの2乗の総和」が最も小さくなるようなAの値を決める ⇒ 最小二乗法
- このときのA を$\tilde{A}$ とする



最適な係数$A=\tilde{A}$の決定

- 次のような量を考える
  - $\sum_{i=1}^{N}(y_i - Ax_i)^2 - \sum_{i=1}^{N}\left(y_i - \tilde{A}x_i\right)^2$
- この式中のAは任意の値として、この量の意味を考える。
  - $\tilde{A}$は最小2乗法における最適な、すなわち誤差の平方和を最も小さくする係数Aを示す
  - Aは任意の値なので、誤差の平方和は$\tilde{A}$よりも必ず大きくなる
  - Aが$\tilde{A}$に等しいときのみ、この式はゼロとなる
- よって、この式は不等式に置き換えることができる
  - $\sum_{i=1}^{N}(y_i - Ax_i)^2 - \sum_{i=1}^{N}\left(y_i - \tilde{A}x_i\right)^2 \geq 0$

最適な係数$A = \tilde{A}$の決定

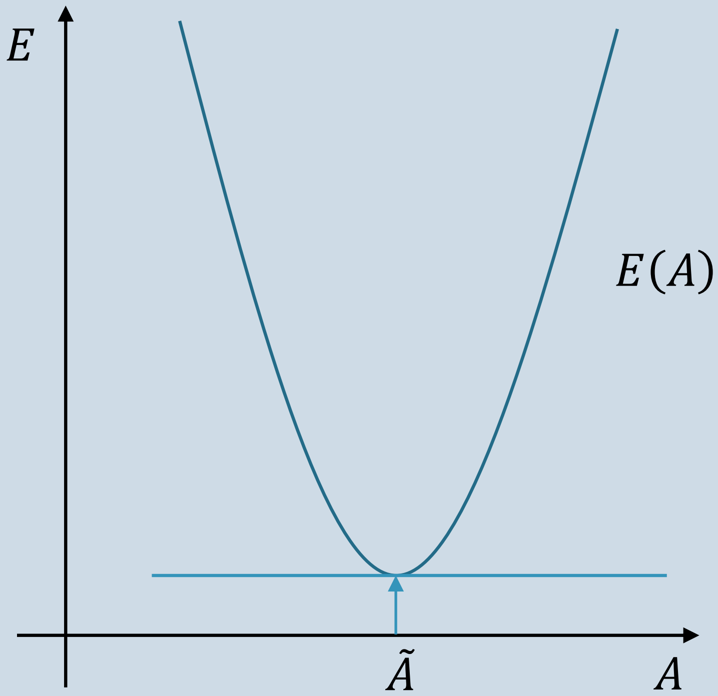
- 式変形
  - $\sum_{i=1}^{N}(y_i - Ax_i)^2 - \sum_{i=1}^{N}(y_i - \tilde{A}x_i)^2 \geq 0$
  - $\sum_{i=1}^{N}(y_i^2 - 2Ax_iy_i + A^2x_i^2) - \sum_{i=1}^{N}(y_i^2 - 2\tilde{A}x_iy_i + \tilde{A}^2x_i^2) \geq 0$
  - $\sum_{i=1}^{N} y_i^2 - 2A\sum_{i=1}^{N} x_iy_i + A^2\sum_{i=1}^{N} x_i^2 - \sum_{i=1}^{N} y_i^2 + 2\tilde{A}\sum_{i=1}^{N} x_iy_i - \tilde{A}^2\sum_{i=1}^{N} x_i^2 \geq 0$
  - $-2A\sum_{i=1}^{N} x_iy_i + A^2\sum_{i=1}^{N} x_i^2 + 2\tilde{A}\sum_{i=1}^{N} x_iy_i - \tilde{A}^2\sum_{i=1}^{N} x_i^2 \geq 0$
- $p = \sum_{i=1}^{N} x_i^2, q = \sum_{i=1}^{N} x_iy_i$ と置き換える
  - $-2Aq + A^2p + 2\tilde{A}q - \tilde{A}^2p \geq 0$
  - $p\left(A^2 - 2A\frac{q}{p} - \tilde{A}^2 + 2\tilde{A}\frac{q}{p}\right) \geq 0$
  - $p\left(A^2 - 2A\frac{q}{p} + \frac{q^2}{p^2} - \tilde{A}^2 + 2\tilde{A}\frac{q}{p} - \frac{q^2}{p^2}\right) \geq 0$
  - $p\left\{\left(A - \frac{q}{p}\right)^2 - \left(\tilde{A} - \frac{q}{p}\right)^2\right\} \geq 0$

最適な係数$A = \tilde{A}$の決定

- $p > 0$ なので、式変形の結果、次の式を得る
  - $\left(A - \frac{q}{p}\right)^2 - \left(\tilde{A} - \frac{q}{p}\right)^2 \geq 0$
- A が任意の値を持つとき、この不等式を満たすには、$\left(\tilde{A} - \frac{q}{p}\right)^2 = 0$ が成立する必要がある
  - $\tilde{A} = \frac{q}{p} = \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i y_i}{\sum_{i=1}^{N} x_i^2}$
- 最適な係数$\tilde{A}$ は上の式で決定できる
  - オームの法則における抵抗係数R は、実験値I, Vから上の式を用いて決定できる

最適な係数$A = \tilde{A}$の決定

- 最適な係数$\tilde{A}$ の決定に対する別解
  - $\sum_{i=1}^{N}(y_i - Ax_i)^2$ を最小にするA を探す $\Rightarrow$ $\sum_{i=1}^{N}(y_i - Ax_i)^2$ の極小値を求める
- $\sum_{i=1}^{N}(y_i - Ax_i)^2$ の微分係数をゼロとするA を求める
  - $\frac{d}{dA}\sum_{i=1}^{N}(y_i - Ax_i)^2 = 0$
  - $\frac{d}{dA}\sum_{i=1}^{N}\left(y_i^2 - 2Ax_iy_i + A^2x_i^2\right) = 0$
  - $\sum_{i=1}^{N}\left(-2x_iy_i + 2Ax_i^2\right) = 0$
  - $2\left\{A\sum_{i=1}^{N}x_i^2 - \sum_{i=1}^{N}x_iy_i\right\} = 0$
  - $2\{Ap - q\} = 0$



$$E(A) = \sum_{i=1}^{N}(y_i - Ax_i)^2$$

2つの未知定数を含む最小2乗法

- N回の測定で得られた測定データ(x_i, y_i) $(i = 1,2, \dots, N)$に対し、理論式$y = Ax + B$ が成立する場合を考える
- 未知定数が1つの場合と同様、「各点から直線$y = Ax + B$ に垂直に下した線分の長さの2乗の総和」が最も小さくなるようなA, Bの値を決める
- 残差平方和を最小にするような係数A, B を求める
  - $E(A,B) = \sum_{i=1}^{N}(y_i - Ax_i - B)^2$
- 各係数の最適値$\tilde{A}, \tilde{B}$ を求める
  - 微分係数がゼロとなるA, B を求めればよい

２つの未知定数を含む最小2乗法

- $E(A,B)$ に対し、A の偏微分を行う
  - $\frac{\partial E}{\partial A} = \frac{\partial}{\partial A}\sum_{i=1}^{N}(y_i - Ax_i - B)^2$
  - $\frac{\partial E}{\partial A} = \frac{\partial}{\partial A}\sum_{i=1}^{N}\left(A^2x_i^2 - 2Ax_iy_i + 2ABx_i + y_i^2 + B^2 - 2By_i\right)$
  - $\frac{\partial E}{\partial A} = \sum_{i=1}^{N}\left(2Ax_i^2 - 2x_iy_i + 2Bx_i\right)$
  - $\frac{\partial E}{\partial A} = 2\left\{A\sum_{i=1}^{N}x_i^2 + B\sum_{i=1}^{N}x_i - \sum_{i=1}^{N}x_iy_i\right\} = 0$
- $E(A,B)$ に対し、B の偏微分を行う
  - $\frac{\partial E}{\partial B} = \frac{\partial}{\partial B}\sum_{i=1}^{N}\left(A^2x_i^2 - 2Ax_iy_i + 2ABx_i + y_i^2 + B^2 - 2By_i\right)$
  - $\frac{\partial E}{\partial B} = \sum_{i=1}^{N}(2Ax_i + 2B - 2y_i)$
  - $\frac{\partial E}{\partial B} = 2\left\{A\sum_{i=1}^{N}x_i + BN - \sum_{i=1}^{N}y_i\right\} = 0$

2つの未知定数を含む最小2乗法

- 即ち2つの未知定数に対して、2つの条件を満たさなければならない（正規方程式）
  - $\begin{cases} \frac{\partial E}{\partial A} = 2\left\{A\sum_{i=1}^{N} x_i^2 + B\sum_{i=1}^{N} x_i - \sum_{i=1}^{N} x_i y_i\right\} = 0 \\ \frac{\partial E}{\partial B} = 2\left\{A\sum_{i=1}^{N} x_i + BN - \sum_{i=1}^{N} y_i\right\} = 0 \end{cases}$
- これは未知定数A, Bの連立一次方程式となっている
  - $p = \sum_{i=1}^{N} x_i^2, q = \sum_{i=1}^{N} x_i y_i, r = \sum_{i=1}^{N} x_i, s = \sum_{i=1}^{N} y_i$とおく
  - $\begin{cases} 2\{Ap + Br - q\} = 0 \\ 2\{Ar + BN - s\} = 0 \end{cases}$
- 連立方程式の2番目の式より、
  - $B = \frac{s - Ar}{N}$
- 連立方程式の1番目の式に代入し、
  - $Ap + \frac{s - Ar}{N} r - q = 0$
  - $ANp + rs - Ar^2 - Nq = 0$
  - $A(Np - r^2) = Nq - rs$
  - $A = \frac{Nq - rs}{Np - r^2}$

２つの未知定数を含む最小2乗法

- 未知定数(A, B)をp, q, r, sで表現
- $$\begin{cases} A = \frac{Nq-rs}{Np-r^2} \\ B = \frac{s-r\frac{Nq-rs}{Np-r^2}}{N} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A = \frac{Nq-rs}{Np-r^2} \\ B = \frac{1}{N}\left\{\frac{(Nps-r^2s)-Nqr+r^2s}{Np-r^2}\right\} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A = \frac{Nq-rs}{Np-r^2} \\ B = \frac{ps-qr}{Np-r^2} \end{cases}$$
- このときの未知定数$(A, B) = \left(\tilde{A}, \tilde{B}\right)$であるので、
- $$\begin{cases} \tilde{A} = \frac{N\sum_{i=1}^{N} x_i y_i - \sum_{i=1}^{N} x_i \sum_{i=1}^{N} y_i}{N\sum_{i=1}^{N} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{N} x_i\right)^2} \\ \tilde{B} = \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i^2 \sum_{i=1}^{N} y_i - \sum_{i=1}^{N} x_i y_i \sum_{i=1}^{N} x_i}{N\sum_{i=1}^{N} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{N} x_i\right)^2} \end{cases}$$

2つの未知定数を含む最小2乗法

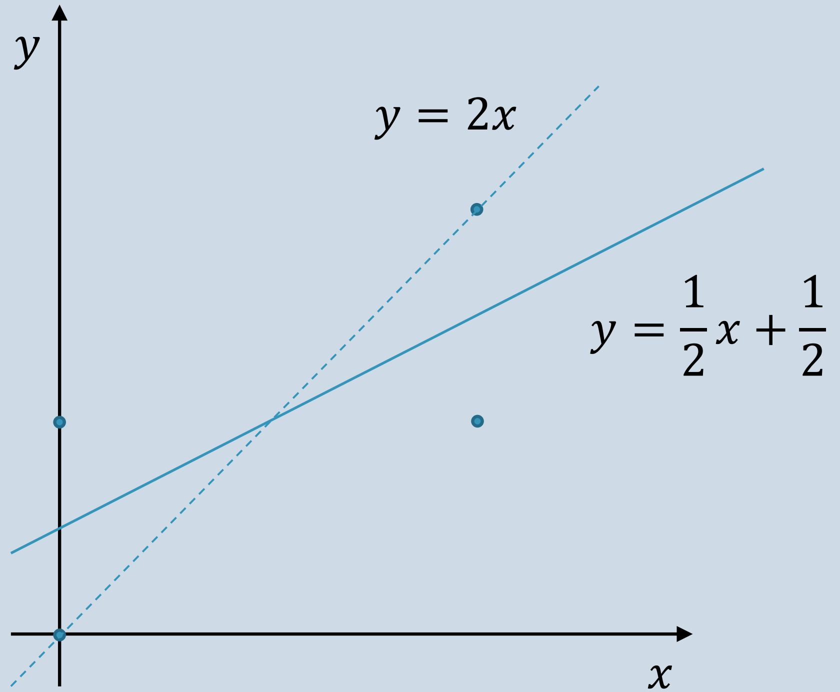
- 実際のデータが与えられたとき、この形で定数$(\tilde{A}, \tilde{B})$を計算するのは厄介
- 統計情報を使って、計算方法の変換を行ってやる
  - $B = \frac{s-Ar}{N} = \frac{s}{N} - \frac{r}{N}A$
- ここで標本平均$\overline{X}, \overline{Y}$を用い、$\overline{X} = \frac{r}{N} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i, \overline{Y} = \frac{s}{N} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} y_i$として置き換える
  - $B = \overline{Y} - \overline{X}A$
- 同様に、標本平均で定数Aを書き換える
  - $A = \frac{Nq-rs}{Np-r^2} = \frac{\frac{q}{N}-\frac{rs}{N^2}}{\frac{p}{N}-\left(\frac{r}{N}\right)^2} = \frac{\frac{q}{N}-\overline{X}\,\overline{Y}}{\frac{p}{N}-\overline{X}^2} = \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i y_i - N\overline{X}\,\overline{Y}}{\sum_{i=1}^{N} x_i^2 - N\overline{X}^2}$
  - $A = \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i y_i - 2N\overline{X}\,\overline{Y} + N\overline{X}\,\overline{Y}}{\sum_{i=1}^{N} x_i^2 - 2N\overline{X}^2 + N\overline{X}^2} = \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i y_i - \overline{Y}\sum_{i=1}^{N} x_i - \overline{X}\sum_{i=1}^{N} y_i + \sum_{i=1}^{N} \overline{X}\,\overline{Y}}{\sum_{i=1}^{N} x_i^2 - 2\overline{X}\sum_{i=1}^{N} x_i + \sum_{i=1}^{N} \overline{X}^2} = \frac{\sum_{i=1}^{N}\left(x_i y_i - x_i\overline{Y} - y_i\overline{X} + \overline{X}\,\overline{Y}\right)}{\sum_{i=1}^{N}\left(x_i^2 - 2x_i\overline{X} + \overline{X}^2\right)} = \frac{\sum_{i=1}^{N}(x_i-\overline{X})(y_i-\overline{Y})}{\sum_{i=1}^{N}(x_i-\overline{X})^2}$

２つの未知定数を含む最小2乗法

- 即ち、定数$(\tilde{A}, \tilde{B})$ は次のように求めることもできる
  - $\tilde{A} = \frac{\sum_{i=1}^{N}(x_i - \overline{X})(y_i - \overline{Y})}{\sum_{i=1}^{N}(x_i - \overline{X})^2} = \frac{V_{xy}}{V_x}$
  - $\tilde{B} = \overline{Y} - \overline{X}\tilde{A}$
  - ここでV_{xy} はx とy の共分散、V_x はx の分散を示す
- 統計学における分散V, 標準偏差S, 相関係数r を使えば
  - $\tilde{A} = \frac{V_{xy}}{V_x} = \frac{V_{xy}}{S_x S_y}\frac{S_y}{S_x} = r_{xy}\frac{S_y}{S_x}$
- という変形を行うこともできる

2乗による距離推定の妥当性

- 距離推定を最小「2乗」で行うのはなぜか？
  - 正と負の誤差で、お互いに打ち消しあわないようにするため
  - ならば絶対値で求めてもよい　⇒　最小絶対値法
- しかし、最小絶対値法は一般的ではない
  - 点(0, 0)(0, 1)(2, 1)(2, 2)の4点のデータが与えられたときの尤もらしい直線を考える
  - 最小二乗法　⇒　$y = \frac{1}{2}x + \frac{1}{2}$ という回帰式を得る
    - 誤差推定: 2乗距離ならば1, 絶対距離ならば2となる
  - $y = 2x$ という直線を考える
    - 誤差推定: 2乗距離ならば2, 絶対距離ならば2となる
  - 最小絶対値法では、一意に係数が決まらない
  - 4乗、6乗も同様に、一意に決まらない可能性がある



線形最小2乗法

- 理論式の複雑、かつ未知定数が多くても、最小2乗法を適用することはできる
- N回の測定で得られた測定データ(x_i, y_i) $(i = 1,2, \dots, N)$に対し、M個の未知定数A_i $(i = 1,2, \dots, M)$を含む理論式を考える
  - $y = \sum_{i=1}^{M} A_i f_i(x)$
- ここで、$f_i(x)$ は予め与えられており、互いに1次独立なx の関数とする
  - $M = 2, A_1 = A, A_2 = B, f_1(x) = x, f_2(x) = 1$ とすると、$y = Ax + B$ の理論式に等しい
- 最適なA_i の組み合わせは、次の誤差関数E を最小にするものである
  - $E(A_1, A_2, \dots, A_M) = \sum_{j=1}^{N} \left(y_j - \sum_{i=1}^{M} A_i f_i(x_j)\right)^2$

線形最小2乗法

- したがって、下記の式を全て満足するA_i の組を探せばよい
  - $\frac{\partial E}{\partial A_k} = -2\sum_{j=1}^{N}\{f_k(x_j)(y_j - \sum_{i=1}^{M} A_i f_i(x_j))\} = 0 \qquad (k = 1,2,\ldots,M)$
- 最適値$\widetilde{A_i}$ を求める式は、次のように導かれる
  - $\sum_{j=1}^{N}\{f_k(x_j)(y_j - \sum_{i=1}^{M} \widetilde{A_i} f_i(x_j))\} = 0$
  - $\sum_{j=1}^{N}\{y_j f_k(x_j) - f_k(x_j)\sum_{i=1}^{M} \widetilde{A_i} f_i(x_j)\} = 0$
  - $\sum_{j=1}^{N}\{y_j f_k(x_j)\} = \sum_{j=1}^{N}\{f_k(x_j)\sum_{i=1}^{M} \widetilde{A_i} f_i(x_j)\}$
  - $\sum_{j=1}^{N} y_j f_k(x_j) = \sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{M} \widetilde{A_i} f_k(x_j) f_i(x_j)$
  - $\sum_{j=1}^{N} y_j f_k(x_j) = \sum_{i=1}^{M} \widetilde{A_i}\{\sum_{j=1}^{N} f_k(x_j) f_i(x_j)\} \qquad (k = 1,2,\ldots,M)$

線形最小2乗法

- ここで、$p_{k,i}$ とq_k を次のように定義する
  - $p_{k,i} = \sum_{j=1}^{N} f_k(x_j) f_i(x_j)$
  - $q_k = \sum_{j=1}^{N} y_j f_k(x_j)$
- よって最適値$\widetilde{A_i}$ の式は、次のように変形できる
  - $q_k = \sum_{i=1}^{M} \widetilde{A_i} p_{k,i} \qquad (k = 1,2, \dots, M)$
- $\widetilde{A_i}$ に関する連立方程式なので、行列で表記できる
  - $\begin{bmatrix} p_{1,1} & p_{1,2} & \cdots & p_{1,M} \\ p_{2,1} & p_{2,2} & \cdots & p_{2,M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{M,1} & p_{M,2} & \cdots & p_{M,M} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \widetilde{A_1} \\ \widetilde{A_2} \\ \vdots \\ \widetilde{A_M} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ \vdots \\ q_M \end{bmatrix}$
- 方程式の性質から特別な解法が考えられている（例えばQR分解）
- 単純な方程式の場合、ガウスの消去法などのシンプルな解法で解くこともできる