最小 2 乗解

はじめに

筆者が工学の 3 大ツールとするのは下記である．

＊最小 2 乗法

＊ニュートン法

＊フーリエ変換

本稿では最小 2 乗法の使い方とその一般形について述べる．

最小 2 乗法

最小 2 乗法の具体的な例として 1 次関数の係数を算出する数式が(1)～(3)である．

$$y = ax + b \quad (1)$$

$$a = \frac{\sum_{n=1}^{k} x_n y_n - \sum_{n=1}^{k} x_n \sum_{n=1}^{k} y_n}{k \sum_{n=1}^{k} {x_n}^2 - \left(\sum_{n=1}^{k} x_n\right)^2} \quad (2)$$

$$b = \frac{\sum_{n=1}^{k} {x_n}^2 \sum_{n=1}^{k} y_n - \sum_{n=1}^{k} x_n \sum_{n=1}^{k} x_n y_n}{k \sum_{n=1}^{k} {x_n}^2 - \left(\sum_{n=1}^{k} x_n\right)^2} \quad (3)$$

k：データの個数

一般に最小 2 乗法というと，このような解析解のイメージがある．しかしながら工学で用いられる真の最小 2 乗法とは，任意の曲面へ汎化したカーブフィッティングなのである．そこで本稿では，今後，このカーブフィッティングを最小 2 乗解と述べることとする．

最小 2 乗解

最小 2 乗解で重要なのは，下記を拡張した曲面(多項式)を扱える点にある．

＊多変数

＊任意次数の変数

＊項における変数の組み合わせ(乗算，あるいは除算，任意の関数による写像)

各項が乗算のみで構成される例(4)を挙げる．一般的なモデルかと思う．

$$f(x,y,z) = a_1x^4 + a_2x^2 + a_3y^3 + a_4y^2 + a_5y + a_6z + a_7xz + a_8yz + a_9 \quad (4)$$

この例では 9 ケの係数を求めて曲面を特定しなければならない．連立方程式を解くためには 9 ケのデータが必要となる(5)．

$$AX = B \quad (5)$$

$$A = \begin{bmatrix} {x_1}^4 & {x_1}^2 & {y_1}^3 & {y_1}^2 & y_1 & z_1 & x_1z_1 & y_1z_1 & 1 \\ {x_2}^4 & {x_2}^2 & {y_2}^3 & {y_2}^2 & y_2 & z_2 & x_2z_2 & y_2z_2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ {x_k}^4 & {x_k}^2 & {y_k}^3 & {y_k}^2 & y_k & z_k & x_kz_k & y_kz_k & 1 \end{bmatrix} \quad (6)$$

$$X = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_k \end{bmatrix} \quad (7)$$

$$B = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_k \end{bmatrix} \quad (8)$$

計測データのセット：$(x_1,y_1,z_1,f_1),(x_2,y_2,z_2,f_2),\cdots(x_k,y_k,z_k,f_k)$

$$k = 9$$

計測データは最低 9 ケ必要というだけで，現実にはそれ以上の個数のデータを取得するはずである．これはAが過剰係数であった場合の解，すなわち最小 2 乗解(9)ということになる．

$$A^\top AX = A^\top B \quad (9)$$

(9)が計測データとフィッティングカーブとの差(残差 2 乗和)を最小化する証明については本稿の趣旨ではなく割愛する．なお，$(A^\top A)^{-1}A^\top$を疑似逆行列と呼称することもある．この後の連立方程式の解法についてだが，数値計算ではガウスの消去法が一般的である．

(5)の形式が当てはめられるのであれば，結合(加算)の対象は超越関数であってもかまわない．例えば(10)である．

$$f(x,y) = a_1x + a_2y + a_3e^{-x} \quad (10)$$

他に非線形であっても対応できることもある(「最小 2 乗解の例」参照)．
要するに，関数の形式(ひな形)が与えられているのであれば最小 2 乗解は適用できる．

結論だが，工学において，(9)の形式を使えるようにするモデル化こそが重要なのである．

この点について述べる専門書は皆無といってよく，本稿の趣旨である．信号処理といった観点からすると(4)のような多項式はどのような曲面であってもフィッティング可能である．例えばカメラ撮影した白黒画像があったとし，これを曲面とみなしてカーブフィッティングすることも不可能ではない．だが，それを実現するのであれば，一般にはフーリエ変換が使われる．多項式近似は任意のカーブをフーリエ級数で表現できることと共通の認識がある．

＊多項式：変数の次数 ⇔ フーリエ級数での高調波の次数

すなわち，極値の数 ≒ 周波数

繰り返すが，ツールが使えるよう，モデル化を工夫する，それこそが工学のあり方といえる．他に，カーブフィッティングは情報の圧縮という視点もある．これは計測データが表現する曲面をわずかな数の係数で表現できるからである．以上の洞察から様々な応用にもつながることもある．