最小自乗法[1]

– 考え方と計算法 –

H. Miyamura

1 考え方

ある物理量 y が n 個の変数 x_1、x_2、... x_n の関数、すなわち、$y = f(x_1,\ x_2,\ ...,\ x_n)$ で表されるとする。あるいはこれを、n 次元の点 $X = (x_1, x_2, ...x_n)$ の関数とみて

$$y = f(X) \tag{1}$$

のように記述してもよい。最小自乗法とは、多くの点 X について y の値を測定し、その値を基にして、関数 $f(X)$ の「最も確からしい」形を決める方法のひとつである。

今、$k = 1, 2, ...N$ について、点 $X_k = (x_{k_1},\ x_{k_2},\ \ldots\ x_{k_n})$ における y_k の値が得られているとする (ただし $N \geq n$)。y_k は実測値であるから、$f(X)$ の近傍で、多少の誤差を含んで均等に分布するはずである。「最も確からしく」するためには、誤差を最も小さくすればよい。これは、**各々の実測値 y_k と理論値 $f(X_k)$ の差の自乗を合計した値が最小になるように $f(X)$ の形を決める**ことによって実現される。すなわち、

$$\Delta_k = y_k - f(X_k) \qquad k = 1, 2, 3, \ldots N \tag{2}$$

として、$\displaystyle\sum_{k=1}^{N} \Delta_k^2$ が最小になるように $f(X)$ を決めようということである。

2 線形最小自乗法

2.1 定数項がない (＝斉次形の) 場合

$f(X)$ が x_1～x_n の斉次線形結合である場合、すなわち係数を a_1～a_n として、

$$f(X) = a_1x_1 + a_2x_2 + \ldots + a_nx_n = \sum_{i=1}^{n} a_ix_i \qquad \text{(斉次形)} \tag{3}$$

[1] 平成 19 年 9 月 5 日、初版文書化：　9 月 10 日改訂

と記述できる場合は、各点 X_k における実測値と理論値の差の自乗は、

$$\Delta_k^2 = \{y_k - (a_1 x_{k_1} + a_2 x_{k_2} + ... + a_n x_{k_n})\}^2 = (y_k - \sum_{i=1}^{n} a_i x_{k_i})^2 \tag{4}$$

である。N 組の測定データについて、この合計

$$\sum_{k=1}^{N} \Delta_k^2 = \sum_{k=1}^{N} (y_k - \sum_{i=1}^{n} a_i x_{k_i})^2 \tag{5}$$

を最小にするように、$a_1 \sim a_n$ を決めることを考える。 **(— ここで、『理屈はおいといて、さっさと方法だけ知りたい！』と言う人は、３章「実際の計算」を先に読むこと —)** この式は n 個の変数 a_i についての関数 $F(a_1, a_2, \ldots a_n)$ であり、最小にするには、極小値を与える $(a_1, a_2, \ldots a_n)$ の組を求めればよい。極小であるということは微分係数がゼロ、すなわち任意の a_j についてこの式を偏微分してもゼロになるということだから、必要条件として以下の条件が要請される[2]。

$$\begin{aligned} F(a_1, a_2, \ldots a_n) &= \sum_{k=1}^{N} (y_k - \sum_{i=1}^{n} a_i x_{k_i})^2 \\ \frac{\partial F}{\partial a_j} &= 0\ ; \qquad (j = 1, 2, 3, \ldots n) \end{aligned} \tag{6}$$

式 (6) を計算する。

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial a_j} &= = -2 \sum_{k=1}^{N} x_{k_j} (y_k - \sum_{i=1}^{n} a_i x_{k_i}) \\ &= -2 \sum_{k=1}^{N} x_{k_j} y_k + 2 \sum_{k=1}^{N} \sum_{i=1}^{n} a_i x_{k_j} x_{k_i} = 0 \\ \therefore \qquad & \sum_{k=1}^{N} x_{k_j} y_k = \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{N} x_{k_j} x_{k_i} a_i \end{aligned} \tag{7}$$

ここで、$t_j = \sum_{k=1}^{N} x_{k_j} y_k$、$S_{ji} = \sum_{k=1}^{N} x_{k_j} x_{k_i}$ とおけば ($S_{ij} = S_{ji}$ に注意)、

$$t_j = \sum_{i=1}^{n} S_{ji} a_i \qquad (j = 1, 2, 3, ...n) \tag{8}$$

[2]実際には「必要十分条件」になっている

となる。これは行列表記できて、

$$\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & \dots & S_{1n} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & \dots & S_{2n} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} & \dots & S_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{n1} & S_{n2} & S_{n3} & \dots & S_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \\ \vdots \\ t_n \end{pmatrix} \tag{9}$$

が得られる。行列 (S_{ji}) に逆行列がある場合、それを両辺の左側からかけて、

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ a_i \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cdot & \dots & \cdot \\ \vdots & S_{\triangle\triangle} & \vdots \\ \cdot & \dots & \cdot \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \vdots \\ t_j \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{10}$$

によって、($a_1, a_2, ...a_n$) が決定される。

2.2 定数項がある (＝非斉次形の) 場合

式 (3) が定数項を含む場合、すなわち

$$f(X) = \sum_{i=1}^{n} a_i x_i = a_1 x_1 + a_2 x_2 + \ldots + a_n x_n + b$$

の場合は、式 (3) において $n \to n+1$ とおき換え、常に $x_{n+1} = 1$ とおけば、$a_{n+1} = b$ である。あとは斉次形の場合と同じ計算をすればよい。

3 実際の計算

先に書いたとおり、非斉次形は斉次形の特殊な場合であるから、斉次形だけ考えれば充分である。実際の計算は、与えられた N 組のデータから n^2 個の

$$S_{ji}\ (= S_{ij}) = \sum_{k=1}^{N} x_{k_j} x_{k_i} = x_{1_j} x_{1_i} + x_{2_j} x_{2_i} + ... + x_{N_j} x_{N_i} \tag{11}$$

を計算 (対称性 $S_{ji} = S_{ij}$ があるので実際には $n(n+1)/2$ 個) し、さらに n 個の

$$t_j = \sum_{k=1}^{N} x_{k_j} y_k = x_{1_j} y_1 + x_{2_j} y_2 + ... + x_{N_j} y_N \tag{12}$$

を計算して式 (9) の行列表記に直し、逆行列を求めて (10) から $a_1, a_2, a_3, \ldots a_n$ を決定する。逆行列の計算は Excel でもできる... らしい...。