光学設計ノーツ 85 ver. 1.0

最小二乗法について 2

本連載 53 回において最小二乗方法について触れさせていただいた。少し間が空いてしまったが、今回から再びより具体的に最小二乗法の利用法について解説させて頂きたい。

1. 多元方程式

以本連載 53 回では一元の最も簡単な

y＝ax

の方程式をデータにフィッティングさせること、つまり a を得ることについて考えた。今回はより一般的に多元の変数に拡張した場合について計算例を挙げてみよう。以下の様な関数を扱う。

$$y = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_d x_d \qquad (1)$$

x_1 から x_d は変数であり、測定ではサンプリング座標を表す。これをベクトル表現すれば、

$$\tilde{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ x_d \end{pmatrix} \qquad (2)$$

であり、求めたいのは、

$$\boldsymbol{w} = \begin{pmatrix} w_0 \\ w_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ w_d \end{pmatrix} \qquad (3)$$

である。従って、

$$y = \mathbf{w}^T\tilde{\boldsymbol{x}} \qquad (4)$$

と表現できる。ここで、x の組みの変化により、y も

$$y_1 = \mathbf{w}^T\tilde{\mathbf{x}}_1$$

$$y_2 = \mathbf{w}^T\tilde{\mathbf{x}}_2$$

$$\cdots\cdot$$

$$y_n = \mathbf{w}^T\tilde{\mathbf{x}}_n$$

の様にいくつも値を持ち得るわけであるから, y もベクトルとして、

$$\tilde{\boldsymbol{y}} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{w}^T\tilde{\boldsymbol{x}}_1 \\ \boldsymbol{w}^T\tilde{\boldsymbol{x}}_2 \\ \vdots \\ \boldsymbol{w}^T\tilde{\boldsymbol{x}}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_0+w_1x_{11}+w_2x_{12}+\cdots\cdots+w_dx_{1d} \\ w_0+w_1x_{21}+w_2x_{22}+\cdots\cdots+w_dx_{2d} \\ \vdots \\ w_0+w_1x_{n1}+w_2x_{n2}+\cdots\cdots+w_dx_{nd} \end{pmatrix} \qquad (5)$$

よって、以下の行列を考えれば、

$$\tilde{\mathbf{X}} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & x_{1d} \\ 1 & x_{21} & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & & & \vdots \\ 1 & x_{n1} & \cdots & x_{nd} \end{bmatrix} \qquad (6)$$

として

$$\tilde{\boldsymbol{y}} = \tilde{\mathbf{X}}\boldsymbol{w} \qquad (7)$$

と置ける。

ここで、測定値のベクトルを $\boldsymbol{y}$ と置けば、測定値と理論値の誤差関数（評価関数）は以下のように、ノルムの二乗として表せる。

$$\mathbf{E}(\boldsymbol{w}) = \|\boldsymbol{y} - \tilde{\boldsymbol{y}}\|^2 = \|\boldsymbol{y} - \tilde{\mathbf{X}}\boldsymbol{w}\|^2 \qquad (8)$$

$$= \left(\boldsymbol{y} - \tilde{\mathbf{X}}\boldsymbol{w}\right)^T\left(\boldsymbol{y} - \tilde{\mathbf{X}}\boldsymbol{w}\right)$$

$$= \left(\boldsymbol{y}^T - (\tilde{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{w})^T\right)\left(\boldsymbol{y} - \tilde{\mathbf{X}}\boldsymbol{w}\right)$$

$$= \left(\boldsymbol{y}^T - \boldsymbol{w}^T\tilde{\mathbf{X}}^T\right)\left(\boldsymbol{y} - \tilde{\mathbf{X}}\boldsymbol{w}\right)$$

$$= \boldsymbol{y}^T\boldsymbol{y} - \boldsymbol{y}^T\tilde{\mathbf{X}}\boldsymbol{w} \quad - \boldsymbol{w}^T\tilde{\mathbf{X}}^T\boldsymbol{y} + \boldsymbol{w}^T\tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{X}}\boldsymbol{w}$$

１次（一列）の行列であればその行列と転置行列は等しく、

$$(\boldsymbol{y}^T\tilde{\mathbf{X}}\boldsymbol{w}\ )^T = \left(\tilde{\mathbf{X}}\boldsymbol{w}\right)^T\boldsymbol{y} = \boldsymbol{w}^T\tilde{\mathbf{X}}^T\boldsymbol{y}$$

となるので

$$\mathbf{E}(\boldsymbol{w}) = \boldsymbol{y}^T\boldsymbol{y} - 2\boldsymbol{w}^T\tilde{\mathbf{X}}^T\boldsymbol{y} + \boldsymbol{w}^T\tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{X}}\boldsymbol{w} \qquad (9)$$

ここで、行列の微分の公式、

$$\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}}\mathbf{X}^T\mathbf{A} = \mathbf{A} \qquad (10)$$

$$\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}}\mathbf{X}^T\mathbf{A}\mathbf{X} = (\mathbf{A} + \mathbf{A}^T)\mathbf{X} \qquad (11)$$

より、w について微分して、

$$\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}}\mathbf{E} = -2\tilde{\mathbf{X}}^T\boldsymbol{y} + \{\tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{X}} + (\tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{X}})^T\}\boldsymbol{w}$$

$$= -2\tilde{\mathbf{X}}^T\boldsymbol{y} + \{\tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{X}} + (\tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{X}})^T\}\boldsymbol{w} \qquad (12)$$

$(A^TA)^T = A^TA$　　なので

$$= -2\tilde{\mathbf{X}}^T\boldsymbol{y} + 2\tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{X}}\boldsymbol{w} \qquad (13)$$

よって△E＝０となる場合には

$$w = \frac{\tilde{\mathbf{X}}^T\boldsymbol{y}}{\tilde{\mathbf{X}}^T\tilde{\mathbf{X}}} \qquad (14)$$

の関係が成立することになる。

2．正弦波関数を計算してみる

ここで、以下の簡単な関数を考える。

$$y = 2 + 2\sin x \qquad (15)$$

この関数に PC でランダムな乱数を発生させて、加え、

$$y = 2 + 2\sin x + 誤差 \qquad (15)$$

として測定誤差を持った様な状態を再現する。この時、(2)(3)式より

$$\tilde{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} 1 \\ \sin x \end{pmatrix} \qquad (16)$$

$$\boldsymbol{w} = \begin{pmatrix} w_0 \\ w_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix} \qquad (17)$$

であり、この $\boldsymbol{w}$ を最小二乗法により求めたい訳である。例えば測定箇所 x の個数を n とすれば（6）式から

$$\tilde{\mathbf{X}} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} \\ 1 & x_{21} \\ & \vdots \\ 1 & x_{n1} \end{bmatrix} \qquad (18)$$

である。ここで測定値ベクトル $\boldsymbol{y}$ は(15)式からその値が得られて

$$y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ y_n \end{pmatrix} \qquad (19)$$

であるから、さらに重要な(14)式から w が得られる。この計算結果を図 1 から 3 に示す。曲線は(19)式を基に最小二乗法により得られた $\boldsymbol{w}$ による曲線である。

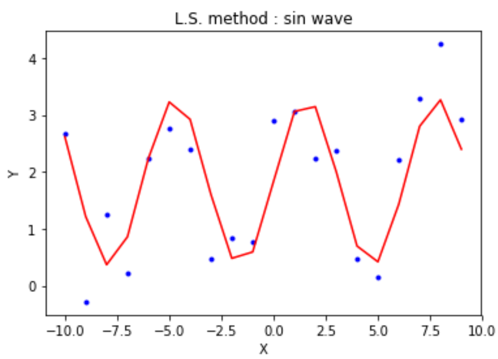

図 1 最小二乗法フィットの結果 1　x ピッチ：は 1 w_0=1.818　w_1=1.465

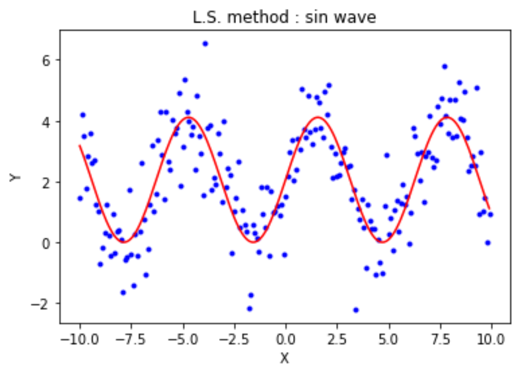

図 2 最小二乗法補フィットの結果 2　x ピッチ：0.1　w_0=2.057　w_1=2.053

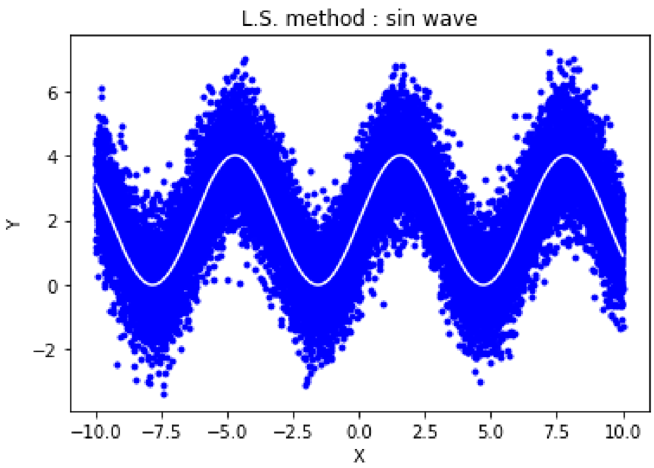

図 3 最小二乗法補フィットの結果 3　x ピッチ:0.001 w_0=2.001　w_1=2.007

3．参考文献

1)　安達忠次：線形代数と解析幾何（森北出版、東京、1976）

2)　金谷健一：これなら分かる最適化数学（共立出版、東京、2008）

3)　今野浩、山下浩：非線形計画法（日科技連、東京、1978）

4)　松山実：基礎数値解析（昭晃堂、東京、1998）

執筆者：牛山 善太

博士（工学）

元東海大学工学部光・画像工学科（レンズ設計）非常勤講師

(株)タイコ 代表取締役

(株)オプティカルソリューションズ 顧問

提供：

株式会社オプティカルソリューションズ

TEL: **03-5833-1332**

Mail: info@osc-japan.com

Web: http://www.osc-japan.com

〒101-0032

東京都千代田区岩本町 2-15-8 MAS 三田ビル 3 階