光学設計ノーツ 86 ver. 1.0

最小二乗法について 3

今回最小二乗法による関数のフィッティングについて取り上げさせていただいたが、今回も前回に引き続き、更に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。ここでは実際にごく普通の連立方程式を、逆関行列を用いて解き、更に最小二乗法によって解いてみることにする。

1. 連立一次方程式の解

本連載第 53 回で最小二乗法による連立方程式、本連載 53 回（1）式の解法について概説させていただいているが、ここではそこから以下のシンプルな 3 元一次連立方程式を抜き出して、その解法について具体的に考えてみよう。

$$
\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 &= b_1 \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 &= b_2 \\
a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 &= b_3
\end{aligned}
\qquad (1)
$$

ここで、（1）式、

$$
\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}
\qquad (2)
$$

を

$$
\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \qquad (3)
$$

と表そう。逆行列が計算可能な場合には(3)式両辺に左から A の逆行列を乗じて、

$$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{Ax}=\mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$$

とでき、$A^{-1}A$ は単位行列、

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

になるので、計算して行って、

$$\mathbf{x}=\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{b} \qquad (4)$$

として **x** を得ることができる。

一般的に解を持つ連立方程式にはこの様に逆関数で対応可能なのであるが、例えば x の数に比べ、式の数の方が多い、未知数に比べ方程式が多い様な場合には、一般的には解は存在しない。その様な場合には本連載 53 回（３）式の様に、

$$\phi=\sum_{i=1}^{m}\left(a_{i1}x_1+a_{i2}x_2+\cdots+a_{in}x_n-b_i\right)^2 \qquad (53\text{-}3)$$

として、上記（２）式の場合には

$$\emptyset=\sum_{i=1}^{3}(a_{i1}x_1a_{i2}x_2a_{i3}x_3-b_i)^2 \qquad (5)$$

として、ここでのφを最小値とするための **x** を探査することになる。これこそが最小二乗法であり、同じく本連載 53 回（14）式としてそこでの解（正規方程式）は得られていて

$$\mathbf{A}^T\mathbf{Ax}=\mathbf{A}^T\mathbf{b} \qquad (53\text{-}14)$$

である。

2. 具体的な例と、逆関数によるその解

それではここで

$$x_1+x_2+2x_3=1$$

$$x_1+2x_2+3x_3=4 \qquad (6)$$

$$4x_1 + x_2 + x_3 = 6$$

と方程式を考えよう。既述の通り、

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{b} \qquad (4)$$

であるので、

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 3 \\ 4 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ 6 \end{pmatrix} \qquad (7)$$

である。よって、上記（５）式の考え方に従えば、単純に逆行列を考えて、

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 3 \\ 4 & 1 & 1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ 6 \end{pmatrix}$$

逆行列を計算して、

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.25 & -0.25 & 0.25 \\ -2.75 & 1.75 & 0.25 \\ 1.75 & -0.75 & -0.25 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ 6 \end{pmatrix}$$

よって

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.75 \\ 5.75 \\ -2.75 \end{pmatrix} \qquad (8)$$

として解が求められる。

3．具体的な例と、最小二乗法によるその解

最小二乗法によって（5）式を用いて見れば、転置行列を計算して、（53-14）式、

$$\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{A}^T\mathbf{b} \qquad (53\text{-}14)$$

に従って、

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 3 \\ 4 & 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 4 \\ 1 & 2 & 1 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 4 \\ 1 & 2 & 1 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ 6 \end{pmatrix} \qquad (9)$$

計算して行って、

$$\begin{pmatrix} 18 & 7 & 9 \\ 7 & 6 & 9 \\ 9 & 9 & 14 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 29 \\ 15 \\ 20 \end{pmatrix}$$

よって、（4）式を考えたのと同様に、

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 18 & 7 & 9 \\ 7 & 6 & 9 \\ 9 & 9 & 14 \end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix} 29 \\ 15 \\ 20 \end{pmatrix}$$

逆行列を計算して、

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.1875 & -1.0625 & 0.5625 \\ -1.0625 & 10.6875 & -6.1875 \\ 0.5625 & -6.1875 & 3.6875 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 29 \\ 15 \\ 20 \end{pmatrix} \qquad (10)$$

が得られる。よって

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.75 \\ 5.75 \\ -2.75 \end{pmatrix}$$

と、（8）式と同様の解が得られる。

4.参考文献

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