最小２乗法

みそ

2005.6.19

1　最小２乗法とは

ある実験から、データが得られたとする。もし、それらのデータが、どのような法則（関数）によって表されるか知らないとしたら、物理学で扱うためにも、どのような法則があるのか知りたい。そこで用いる方法の１つが最小２乗法である。実験等で得られたデータをある関数で表せると予想し、誤差の評価等に使うのである。

データが、ある関数 $f(x)$ によって表されるとする。ここで、次の量 G を

$$G = \sum_{i=1}^{N}(y_i - f(x_i))^2 \tag{1.1}$$

と定義する。x_i, y_i は得られたデータである。この G を最小にする関数 $f(x)$ を見つけるのである。

2　１次式で近似

$f(x)$ が次のような１次多項式

$$f(x) = a_0 + a_1 x \tag{2.1}$$

であるとしよう。これを (1.1) に入れると

$$G = \sum_{i=1}^{N}(y_i - a_0 - a_1 x_i)^2 \tag{2.2}$$

となる。a_0, a_1 を上手く決めて、G が最小にしたい。そのためには

$$\frac{\partial G}{\partial a_0} = 0 \tag{2.3}$$

$$\frac{\partial G}{\partial a_1} = 0 \tag{2.4}$$

の２つの連立方程式を解けばよい。よって (2.2) をこの２つの連立方程式に代入して整理すると

$$a_0 + a_1 \sum_{i=1}^{N} x_i = \sum_{i=1}^{N} y_i \tag{2.5}$$

$$a_0 \sum_{i=1}^{N} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{N} x_i^2 = \sum_{i=1}^{N} x_i y_i \tag{2.6}$$

以後簡単のため

$$\begin{aligned}
A_{00} &= \sum_{i=1}^{N} 1 \\
A_{01} &= \sum_{i=1}^{N} x_i \\
A_{02} &= \sum_{i=1}^{N} y_i \\
A_{10} &= \sum_{i=1}^{N} x_i \\
A_{11} &= \sum_{i=1}^{N} x_i^2 \\
A_{12} &= \sum_{i=1}^{N} x_i y_i
\end{aligned}$$

とし、(2.5)(2.6) を

$$A_{00}a_0 + A_{01}a_1 = A_{02} \tag{2.7}$$

$$A_{10}a_0 + A_{11}a_1 = A_{12} \tag{2.8}$$

と書き直す。a_0, a_1 について解くと

$$a_0 = \frac{A_{02}A_{11} - A_{01}A_{12}}{A_{00}A_{11} - A_{01}A_{10}} \tag{2.9}$$

$$a_1 = \frac{A_{00}A_{12} - A_{10}A_{02}}{A_{00}A_{11} - A_{01}A_{10}} \tag{2.10}$$

となる。また $A_{01} = A_{10}$ である。

3　n 次式で近似

　2次式や3次式の多項式で近似したい場合も1次式と同様な方法で解析的に解けるが、次数が多くなるにつれ計算が大変である。そこで連立方程式を解くプログラム、ガウスの消去法等を用いて解く。

n 次多項式

$$f(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n \tag{3.1}$$

を (1.1) に代入し、次の n 個の連立方程式

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial a_0} &= 0 \\ \frac{\partial G}{\partial a_1} &= 0 \\ &\vdots \\ \frac{\partial G}{\partial a_n} &= 0 \end{aligned}$$

を考える。s をデータの個数とし、行列 $\boldsymbol{A}$ の各成分を

$$\sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{n} A_{ij} = \sum_{k=0}^{s} x_k^{i+j} \tag{3.2}$$

行列 $\boldsymbol{b}$ の各成分を

$$\sum_{i=0}^{n} b_i = \sum_{k=0}^{s} x_k^i y_k \tag{3.3}$$

行列 $\boldsymbol{a}$ の各成分を

$$\sum_{i=0}^{n} a_i = a_i \tag{3.4}$$

とすると n 個の連立1次方程式は

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{a} = \boldsymbol{b} \tag{3.5}$$

と表せる。これは未知数が n 個あり n 個の方程式から成る連立1次方程式であるから、ガウスの消去法等で解ける。