最小二乗法

(Least Square Method)
モデリングとシミュレーション

2019年度

最小二乗法

- データ点の列$\{x_k, y_k\}(k = 0, \cdots n-1)$
- どのような関数形かを推定
- 予想する関数形$y = f(x)$
  - パラメタを推計
- 二乗誤差を最小化するようにパラメタを調整

$$\min\left(\sum_{k=0}^{n-1}\left(y_k - f\left(x_k\right)\right)^2\right)$$

一次関数の場合

- 仮定している関数形：$f(x) = ax + b$
- 二乗誤差

$$S = \sum_{k=0}^{n-1} \left(y_k - a x_k - b \right)^2$$

- 二乗誤差を最小化するパラメタaとb

- Sはaとbの下に凸な二次式になっている。つまり極小を持つ。

$$\frac{\partial S}{\partial a} = -2\sum_{k=0}^{n-1} x_k\left(y_k - ax_k - b\right) = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial b} = -2\sum_{k=0}^{n-1}\left(y_k - ax_k - b\right) = 0$$

- 整理すると

$$a\sum_{k=0}^{n-1} x_k^2 + b\sum_{k=0}^{n-1} x_k = \sum_{k=0}^{n-1} x_k y_k$$

$$a\sum_{k=0}^{n-1} x_k + b\sum_{k=0}^{n-1} 1 = \sum_{k=0}^{n-1} y_k$$

- 次式を代入

$$n\langle x\rangle = \sum_{k=0}^{n-1} x_k, \quad n\langle x^2\rangle = \sum_{k=0}^{n-1} {x_k}^2$$

$$n\langle y\rangle = \sum_{k=0}^{n-1} y_k, \quad n\langle xy\rangle = \sum_{k=0}^{n-1} x_k y_k$$

$$n = \sum_{k=0}^{n-1} 1$$

$$a\langle x^2\rangle + b\langle x\rangle = \langle xy\rangle$$
$$a\langle x\rangle + b = \langle y\rangle$$

- これを解いて

$$a = \frac{1}{{\sigma_x}^2}\left(\langle xy\rangle - \langle x\rangle\langle y\rangle\right)$$
$$b = \frac{1}{{\sigma_x}^2}\left(\langle y\rangle\langle x^2\rangle - \langle xy\rangle\langle x\rangle\right)$$
$$\sigma_x^2 = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2$$

一次の最小二乗法の応用

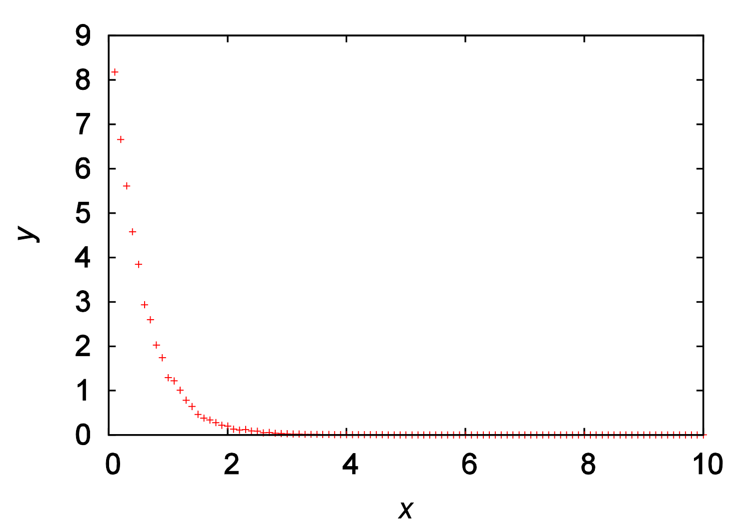
- 一次関数以外にも利用できる
  - 指数関数

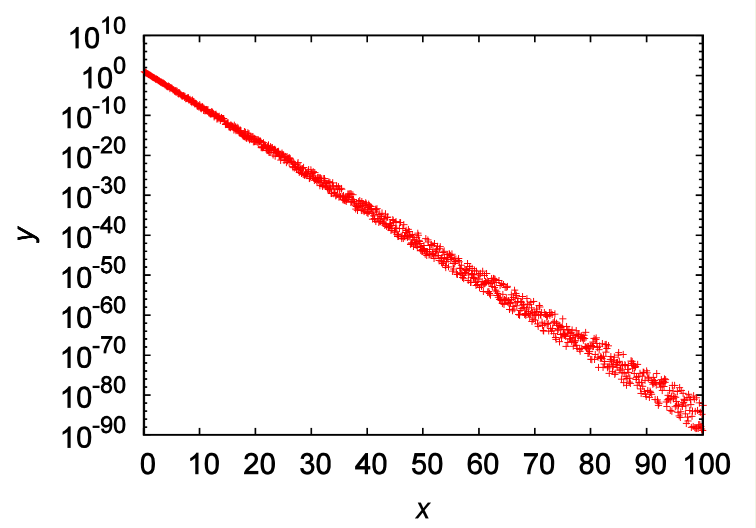
$$y = ae^{bx}$$

  - べき関数

$$y = ax^b$$

片対数 (semi-logarithmic) プロット





縦軸の対数をとる

gnuplotではset log y

- yの値の対数がxに比例している

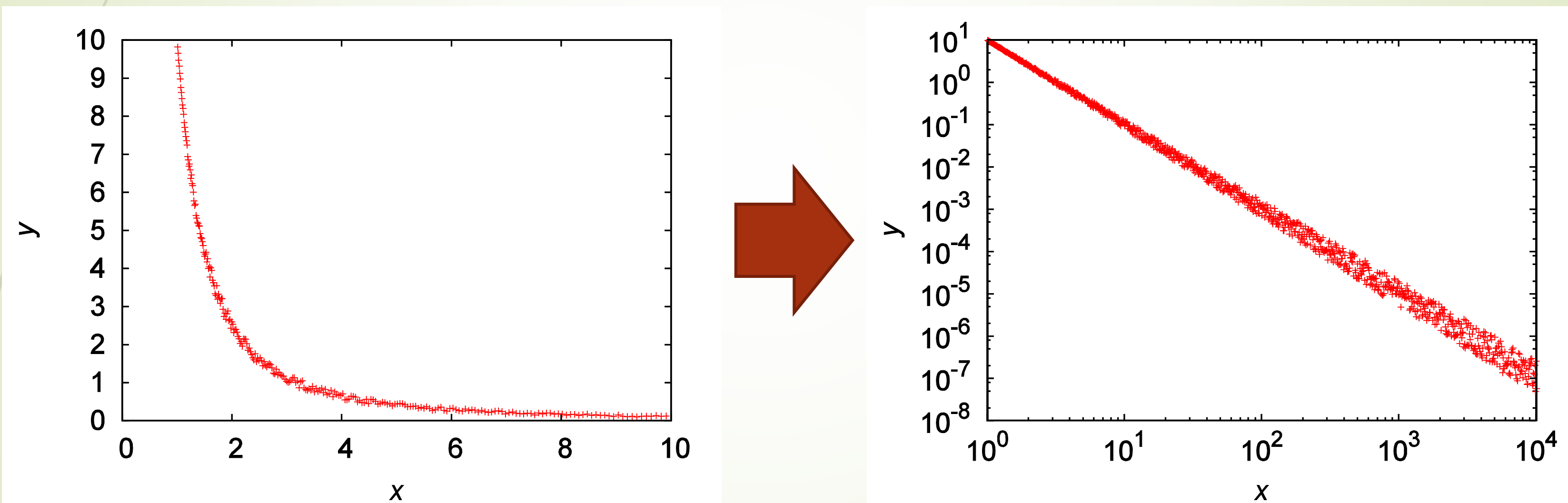
$$\ln y = -ax + b$$

- 両辺の指数関数をとる

$$\exp\left(\ln y\right) = \exp\left(-ax + b\right)$$

$$y = e^{b} e^{-ax}$$

両対数 (double-logarithmic) プロット



縦軸横軸の対数をとる
gnuplotではset log xy

- yの値の対数がxの対数に比例している

$$\ln y = -a \ln x + b$$

- 両辺の指数関数をとる

$$\exp(\ln y) = \exp(-a \ln x + b)$$

$$y = e^{b} \left(\exp(\ln x)\right)^{-a}$$

$$y = e^{b} x^{-a}$$

二次関数の場合

- 仮定している関数形
  - $f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$
- 二乗誤差

$$S = \sum_{k=0}^{n-1} \left(y_k - a_0 - a_1 x_k - a_2 x_k^2 \right)^2$$

- 三つのパラメタa_iついて最小化

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = -2\sum_{k=0}^{n-1}\left(y_k - a_0 - a_1 x_k - a_2 x_k^2\right) = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_1} = -2\sum_{k=0}^{n-1} x_k\left(y_k - a_0 - a_1 x_k - a_2 x_k^2\right) = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_2} = -2\sum_{k=0}^{n-1} x_k^2\left(y_k - a_0 - a_1 x_k - a_2 x_k^2\right) = 0$$

$$\langle y \rangle = a_0 + a_1 \langle x \rangle + a_2 \langle x^2 \rangle$$

$$\langle xy \rangle = a_0 \langle x \rangle + a_1 \langle x^2 \rangle + a_2 \langle x^3 \rangle$$

$$\langle x^2 y \rangle = a_0 \langle x^2 \rangle + a_1 \langle x^3 \rangle + a_2 \langle x^4 \rangle$$

$$Da_0 = \left(\langle x^3\rangle\langle x\rangle - \langle x^2\rangle^2\right)\langle x^2 y\rangle - \left(\langle x^4\rangle\langle x\rangle - \langle x^3\rangle\langle x^2\rangle\right)\langle xy\rangle$$

$$+\left(\langle x^4\rangle\langle x^2\rangle - \langle x^3\rangle^2\right)\langle y\rangle$$

$$Da_1 = -\left(\langle x^3\rangle - \langle x^2\rangle\langle x\rangle\right)\langle x^2 y\rangle - \left(\langle x^4\rangle - \langle x^2\rangle^2\right)\langle xy\rangle$$

$$+\left(\langle x^4\rangle\langle x\rangle - \langle x^3\rangle\langle x^2\rangle\right)\langle y\rangle$$

$$Da_2 = -\left(\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2\right)\langle x^2 y\rangle - \left(\langle x^3\rangle - \langle x^2\rangle\langle x\rangle\right)\langle xy\rangle$$

$$+\left(\langle x^3\rangle\langle x\rangle - \langle x^2\rangle^2\right)\langle y\rangle$$

$$D = \left(\langle x^4\rangle - \langle x^2\rangle^2\right)\left(\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2\right) - \left(\langle x^3\rangle - \langle x^2\rangle\langle x\rangle\right)^2$$

行列演算で表す

$$\langle y \rangle = a_0 + a_1 \langle x \rangle + a_2 \langle x^2 \rangle$$
$$\langle xy \rangle = a_0 \langle x \rangle + a_1 \langle x^2 \rangle + a_2 \langle x^3 \rangle$$
$$\langle x^2 y \rangle = a_0 \langle x^2 \rangle + a_1 \langle x^3 \rangle + a_2 \langle x^4 \rangle$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{pmatrix} \langle y \rangle \\ \langle xy \rangle \\ \langle x^2 y \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \langle x \rangle & \langle x^2 \rangle \\ \langle x \rangle & \langle x^2 \rangle & \langle x^3 \rangle \\ \langle x^2 \rangle & \langle x^3 \rangle & \langle x^4 \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{vmatrix} 1 & \langle x \rangle & \langle x^2 \rangle \\ \langle x \rangle & \langle x^2 \rangle & \langle x^3 \rangle \\ \langle x^2 \rangle & \langle x^3 \rangle & \langle x^4 \rangle \end{vmatrix}$$

$$= \langle x^4 \rangle \langle x^2 \rangle + 2 \langle x \rangle \langle x^2 \rangle \langle x^3 \rangle - \langle x^2 \rangle^3 - \langle x^3 \rangle^2 - \langle x^4 \rangle \langle x \rangle^2$$

$$= D$$

一般化

- m次の多項式
  - $f(x) = \sum_{j=0}^{m} a_j x^j$
- 二乗誤差：データ数n
  - $S = \sum_{k=0}^{n-1} \left(y_k - f(x_k)\right)^2$

- a_iで偏微分

$$\frac{\partial S}{\partial a_i} = -2\sum_{k=0}^{n-1} x_k^i \left(y_k - \sum_{j=0}^{m} a_j x_k^j \right) = 0$$

$$\sum_{k=0}^{n-1} x_k^i y_k = \sum_{k=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{m} a_j x_k^i x_k^j$$

$$\left\langle x^i y \right\rangle = \sum_{j=0}^{m} a_j \left\langle x^{i+j} \right\rangle$$

- 行列で表現

$$\vec{b} = M\vec{a}$$

$$b_i = \langle x^i y \rangle$$

$$M_{ij} = \langle x^{i+j} \rangle$$

- M^{-1}を得ることができれば$\vec{a}$を得ることができる