最小二乗法

2008. 11. 14 鈴木　実

1　最小二乗法とは

一般関数（x, y 平面の 2 次元曲線）

$$F(x, y, a_1, \cdots, a_m) = 0 \tag{1}$$

への回帰を考える。a_k $(k = 1, \cdots, m)$ はパラメータである。最小二乗法は、与えられた点 (x_i, y_i) $(i = 1, \cdots, n)$ の集合に最も近い曲線 $F(x, y, a_1, \cdots, a_m) = 0$ を与えるパラメータ $\{a_k\}$ の値を決定する方法である。「近さ」を表す量として、各点 (x_i, y_i) から曲線 $F(x, y, a_k) = 0$（簡略化した）への距離の 2 乗の総和 S をとる。S の計算の仕方により最小二乗法には垂直法 (perpendicular method)、鉛直法 (vertical method) などがある。

与えられた点（測定点など）を $(x_i, y_i)(i = 1, \cdots, n)$ とする。また、(x_i, y_i) から $F(x, y, a_k) = 0$ へ下ろした垂線の足を (ξ_i, η_i) とする。点 (ξ_i, η_i) は曲線 $F(x, y, a_1, \cdots, a_m) = 0$ 上にあるので、

$$F(\xi_i, \eta_i, a_1, \cdots, a_m) = 0 \tag{2}$$

が成り立つ。

点 (x_i, y_i) から曲線 $F(x, y, a_k) = 0$ に下ろした垂線の長さの 2 乗の総和を S とすると、

$$S = \sum_{i=1}^{n} \{(x_i - \xi_i)^2 + (y_i - \eta_i)\}^2 \tag{3}$$

である。最小二乗法とは、S（つまり分散）を最小にするように a_k を定めることである。

重み付き最小二乗法の場合は

$$S = \sum_{i=1}^{n} \{w_{xi}(x_i - \xi_i)^2 \ + w_{yi}(y_i - \eta_i)^2\} \tag{4}$$

とすれば良い。重み付き最小二乗法の特別な場合として、

$$S = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \eta_i)^2 \tag{5}$$

とする場合がある。(5) 式の場合は鉛直法による最小二乗法に対応する。これは、後に述べるように、垂直法による重み付き最小二乗法において、全ての点で $w_{xi} = 0$, $w_{yi} = 1$ とする場合に等価である。

2 垂直法による重みなし最小二乗法の場合

点 (x_1, y_1) から直線 $ax+by+c=0$ へ下ろした垂線の長さ L は垂線の足を (ξ, η) とすると

$$L = \frac{|ax_1 + by_1 + c|}{\sqrt{a^2+b^2}} \tag{6}$$

となる。点 (x_i, y_i) から曲線への垂線の足を点 (ξ, η) とすると、点 (ξ, η) は、点 (x_i, y_i) から曲線の点 (ξ, η) における接線に垂らした垂線の足でもある。したがって、点 (x_i, y_i) から曲線 $F(x, y, a_k) = 0$ に下ろした垂線の長さを L_i とすると

$$L_i = \frac{1}{\sqrt{\alpha_i^2 + \beta_i^2}} |\alpha_i(x_i - \xi_i) + \beta_i(y_i - \eta_i)| \tag{7}$$

である。ただし、

$$\alpha_i = \frac{\partial F}{\partial x}(\xi_i, \eta_i, a_k) \tag{8}$$

$$\beta_i = \frac{\partial F}{\partial y}(\xi_i, \eta_i, a_k) \tag{9}$$

で直線

$$\alpha_i(x - \xi_i) + \beta_i(y - \eta_i) = 0 \tag{10}$$

は点 (ξ_i, η_i) で曲線 $F(x, y, a_k) = 0$ に接する接線である。この式が接線であることは $F(x, y, a_k) = 0$ を微分して $\partial F/\partial x + \partial F/\partial y \cdot \partial y/\partial x = 0$ から接線の傾き $\partial y/\partial x$ が得られることからも明らかである。あるいは法線ベクトル $(\partial F/\partial x, \partial F/\partial y)$ と接線ベクトル $(x - \xi_i, y - \eta_i)$ の直交条件でもある。

一方、点 (ξ_i, η_i) を通って接線 (10) への法線は

$$\beta_i(x - \xi_i) - \alpha_i(y - \eta_i) = 0 \tag{11}$$

である。法線は点 (x_i, y_i) を通るから

$$\beta_i(x_i - \xi_i) - \alpha_i(y_i - \eta_i) = 0 \tag{12}$$

が成り立つ。次に、点 (x_i, y_i) と点 (ξ_i, η_i) が十分近いとする。その時、$F(x_i, y_i, a_k)$ は点 (ξ_i, η_i) の周りに展開できて、2 次以上の項は無視できるとする。そうすると

$$F(x_i, y_i, a_k) = F(\xi_i, \eta_i, a_k) + \alpha_i(x_i - \xi_i) + \beta_i(y_i - \eta_i) = \alpha_i(x_i - \xi_i) + \beta_i(y_i - \eta_i) \tag{13}$$

とすることができる。2 番目の式で第 1 項は (ξ_i, η_i) が曲線 F 上にあることから消える。

式 (12) と式 (13) から $(x_i - \xi_i)$ と $(y_i - \eta_i)$ を解くと以下の式が得られる。

$$x_i - \xi_i = \frac{\alpha_i}{\alpha_i^2 + \beta_i^2} F(x_i, y_i, a_k) \tag{14}$$

$$y_i - \eta_i = \frac{\beta_i}{\alpha_i^2 + \beta_i^2} F(x_i, y_i, a_k) \tag{15}$$

これを式 (7) に代入すると

$$L_i = \frac{|F(x_i, y_i, a_k)|}{\sqrt{\alpha_i^2 + \beta_i^2}} \tag{16}$$

が得られ、式 (3) に代入すると

$$S = \sum_{i=1}^{n} \frac{F^2(x_i, y_i, a_k)}{\alpha_i^2 + \beta_i^2} \tag{17}$$

が得られる。これを a_k について最小化すれば良いのだが、一般にはこのままでは解けない。それで最小値を与える $\{a_k\}$ の近似値 $\{a_{k_0}\}$ を用いる。$F(x_i, y_i, a_k)$ をこの近似値の周りで展開し 1 次の項までとると

$$F(x_i, y_i, a_k) = F(x_i, y_i, a_{k_0}) + \sum_{k=1}^{n} F_{ak}(a_k - a_{k_0}) \tag{18}$$

ただし

$$F_{a_k} = \frac{\partial F}{\partial a_k}(x_i, y_i, a_{k_0}) \tag{19}$$

である。したがって、(17) 式は

$$S = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\alpha_i^2 + \beta_i^2} \left[F(x_i, y_i, a_{k_0}) + \sum_{k=1}^{m} F_{a_k}(a_k - a_{k_0}) \right]^2 \tag{20}$$

となる。この式において、S を極小とする条件 $\partial S / \partial a_k = 0 (k = 1, \cdots, m)$ より

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\alpha_i^2 + \beta_i^2} \left[F(x_i, y_i, a_{k_0}) F_{a_k} + \sum_{j=1}^{m} F_{a_k} F_{a_j} (a_j - a_{j_0}) \right] = 0 \tag{21}$$

が成り立つ。あるいは書き直すと

$$\sum_{j=1}^{m} \left[\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\alpha_i^2 + \beta_i^2} F_{ak} F_{aj} \right] (a_j - a_{j_0}) = - \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\alpha_i^2 + \beta_i^2} F(x_i, y_i, a_{k0}) F_{a_k} \tag{22}$$

となる。

$$\langle kj \rangle = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\alpha_i^2 + \beta_i^2} F_{a_k} F_{a_j} \tag{23}$$

$$\langle k0 \rangle = - \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\alpha_i^2 + \beta_i^2} F(x_i, y_i, a_{k_0}) F_{a_k} \tag{24}$$

と書き換えると、

$$\left\{ \begin{array}{lclcl} \langle 11 \rangle (a_1 - a_{10}) + & \cdots & + \langle 1m \rangle (a_m - a_{m0}) & = & \langle 10 \rangle \\ & \cdots & & & \\ \langle m1 \rangle (a_1 - a_{10}) + & \cdots & + \langle mm \rangle (a_m - a_{m0}) & = & \langle m0 \rangle \end{array} \right. \tag{25}$$

これが正規方程式である。これより $a_k - a_{k0}$ が求まる。$\langle jk \rangle$ および $\langle j0 \rangle$ の中の α_i と β_i の値は本来点 (ξ_i, η_i) の値を用いて計算すべきであるが、(x_i, y_i) が (ξ_i, η_i) に十分近ければ (x_i, y_i) を用いて良い。

この方法では線形近似を用いているので、線形近似からの誤差は a_k の誤差となる。したがって、得られた a_k の値を近似値として再び (21) 式の正規方程式を解けば良い。これを繰り返せば十分正しい最小二乗法による一般曲線への回帰パラメータの数値を得ることができる。

3　垂直法による重み付き最小二乗法の場合

前節の式 (14) と (15) を式 (4) に代入しても良いが、計算が煩瑣である。そこで次のように考える。点 $(\sqrt{w_{xi}}x_i, \sqrt{w_{yi}}y_i)$ から曲線

$$F\left(\frac{x}{\sqrt{w_{xi}}}, \frac{y}{\sqrt{w_{yi}}}, a_k\right) = 0 \tag{26}$$

上への垂線の足を点 $(\sqrt{w_{xi}}\xi_i, \sqrt{w_{yi}}\eta_i)$ とする。前節において、点 (ξ_i, η_i) は曲線 $F(x, y, a_k) = 0$ 上にあるから、点 $(\sqrt{w_{xi}}\xi_i, \sqrt{w_{yi}}\eta_i)$ は明らかに曲線 (26) 上にある。したがって、$x' = \sqrt{w_{xi}}x_i$, $y' = \sqrt{w_{yi}}y_i$ として、式 (4) は点 (x'_i, y'_i) から曲線

$$F'(x', y', a_k) \equiv F\left(\frac{x'}{\sqrt{w_{xi}}}, \frac{y'}{\sqrt{w_{yi}}}, a_k\right) = 0 \tag{27}$$

上へおろした垂線の長さの 2 乗の総和である。したがって、式 (16) において、

$$L'_i = \frac{|F'(x'_i, y'_i, a_k)|}{\sqrt{\alpha'^2_i + \beta'^2_i}} \tag{28}$$

とすれば良い。ここでさらに、

$$F'(x'_i, y'_i) = F(x_i, y_i) \tag{29}$$

および

$$\alpha'_i = \frac{\partial F'}{\partial x'} = \frac{\partial F(x'/\sqrt{w_{xi}}, y'/\sqrt{w_{yi}})}{\partial x'} = \frac{\partial F}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial x'} = \frac{\partial F}{\partial x}\frac{1}{\sqrt{w_{xi}}} = \frac{\alpha_i}{\sqrt{w_{xi}}} \tag{30}$$

$$\beta'_i = \frac{\partial F'}{\partial y'} = \frac{\partial F(x'/\sqrt{w_{xi}}, y'/\sqrt{w_{yi}})}{\partial y'} = \frac{\partial F}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial y'} = \frac{\partial F}{\partial y}\frac{1}{\sqrt{w_{yi}}} = \frac{\beta_i}{\sqrt{w_{yi}}} \tag{31}$$

を考慮に入れると

$$L'_i = \sqrt{\frac{w_{xi}w_{yi}}{w_{yi}\alpha_i^2 + w_{xi}\beta_i^2}}|F(x_i, y_i, a_k)| \tag{32}$$

となる。これより

$$S = \sum_{i=1}^{n} L'^2_i = \sum_{i=1}^{n} \frac{w_{xi}w_{yi}}{w_{yi}\alpha_i^2 + w_{xi}\beta_i^2}\left[F(x_i, y_i, a_{k_0}) + \sum_{k=1}^{n} F_{a_k}(a_k - a_{k_0})\right]^2 \tag{33}$$

が得られる。あとは前節と同様にして、式 (24) を

$$\langle jk \rangle = \sum_{i=1}^{n} \frac{w_{xi}w_{yi}}{w_{yi}\alpha_i^2 + w_{xi}\beta_i^2} F_{a_k}F_{a_j} \tag{34}$$

$$\langle j0 \rangle = -\sum_{i=1}^{n} \frac{w_{xi}w_{yi}}{w_{yi}\alpha_i^2 + w_{xi}\beta_i^2} F(x_i, y_i, a_{k_0})F_{a_j} \tag{35}$$

と書き換えて、式 (25) の正規方程式を得る。

ここで注意したいことは、式 (32) は、$w_{xi} = w_{yi}$ の場合には (x_i, y_i) と (ξ_i, η_i) を結ぶ線分は曲線 (1) に厳密に垂直であるが、それ以外は垂直ではない。一方、(x'_i, y'_i) と (ξ'_i, η'_i) を結ぶ線分は曲線 $F'(x'y', a_k)$ に垂直である。

なお、式 (4) で、$w_{xi}=0, w_{yi}=1$ の場合は鉛直法と一致するように思われるが、この場合は曲線への垂線の長さの x 成分を 0 とするだけであるから鉛直法とは異なる。

この重み付け最小二乗法は、x 軸と y 軸の目盛の単位が異なる平面上の曲線への最小二乗回帰を計算する場合に有用である。例えば、y 軸の 1 目盛の単位が x 軸の 0.01 倍のときは、y 軸方向に 100 倍拡大されていることになるから、重みを付けなければ y 軸方向は過小に評価され垂直法の効果は本来のものと異なるが、$w_y=10^4$ とすれば本来の垂直法による最小二乗法になる。

4 N 次元への拡張

N 次元への拡張は容易である。N 次元空間において、点 $(x_{1,i},\cdots,x_{N,i})$ の集合があるとき、最小二乗法による曲面

$$F(x_1,\cdots,x_N,a_1,\cdots,a_m)=0 \tag{36}$$

への回帰を考える。曲面（36) 上の点 $(\xi_{1,i},\xi_{2,i},\cdots,\xi_{N,i})$ における接平面は

$$\alpha_{1,i}(q_1-\xi_{1,i})+\cdots+\alpha_{N,i}(q_N-\xi_{N,i})=0 \tag{37}$$

である。ただし、

$$\alpha_{\nu,i}=\frac{\partial F}{\partial q_\nu}(q_{1,i},\cdots,q_{N,i},a_k) \tag{38}$$

である。念のため言うと、これは点 $(\xi_{1,i},\xi_{2,i},\cdots,\xi_{N,i})$ の法線ベクトルは $\mathrm{grad}F$ に比例し、接平面上の任意のベクトルは $\mathrm{grad}F$ に直交するところから出てくる。点 $(\xi_{1,i},\xi_{2,i},\cdots,\xi_{N,i})$ における接平面 (37) への法線は

$$\frac{q_1-\xi_{1,i}}{\alpha_{1,i}}=\cdots=\frac{q_N-\xi_{N,i}}{\alpha_{N,i}} \tag{39}$$

である。法線の単位ベクトル $\mathbf{n}$ は

$$\mathbf{n}=\left(\sum_{\nu=1}^{N}\alpha_{\nu,i}^2\right)^{-1/2}(\alpha_{1,i},\cdots,\alpha_{N,i}) \tag{40}$$

である。法線上の 2 点, $(x_{1,i},\cdots,x_{N,i})$ と $(\xi_{1,i},\xi_{2,i},\cdots,\xi_{N,i})$ の間の距離 L_i は

$$\begin{aligned} L_i &= \mathbf{n}\cdot\{(x_{1,i},\cdots,x_{N,i})-(\xi_{1,i},\cdots,\xi_{N,i})\} \\ &= \left(\sum_{\nu=1}^{N}\alpha_{\nu,i}^2\right)^{-1/2}\{\alpha_{1,i}(x_{1,i}-\xi_{1,i})+\cdots+\alpha_{N,i}(x_{N,i}-\xi_{N,i})\} \end{aligned} \tag{41}$$

となる。

重みなしの S はしたがって、

$$S=\sum_{i=1}^{n}L_i^2=\sum_{i=1}^{n}\left(\sum_{\nu=1}^{N}\alpha_{\nu,i}^2\right)^{-1}\{\alpha_{1,i}(x_{1,i}-\xi_{1,i})+\cdots+\alpha_{N,i}(x_{N,i}-\xi_{N,i})\}^2 \tag{42}$$

となる。

一般の場合の重み付き S の場合を考える。このときは前節と同様の考えで、点 $(\sqrt{w_{1,i}}x_{1,i},\cdots,\sqrt{w_{N,i}}x_{N,i})$ から曲面

$$F\left(\frac{q_1}{\sqrt{w_{1,i}}},\cdots,\frac{q_N}{\sqrt{w_{N,i}}},a_k\right)\equiv F'(q'_1,\cdots,q'_N,a_k)=0 \tag{43}$$

へ下ろした垂線の足 $(\xi'_{1,i},\cdots,\xi'_{N,i})=(\sqrt{w_{1,i}}\xi_{1,i},\cdots,\sqrt{w_{N,i}}\xi_{N,i})$ への距離の 2 乗が S を与える。すなわち

$$S=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\alpha_{1,i}^2}{w_{1,i}}+\cdots+\frac{\alpha_{N,i}^2}{w_{N,i}}\right)^{-1}F^2(q_{1,i},\cdots,q_{N,i},a_k) \tag{44}$$

となる。これより、

$$F(q_{1,i},\cdots,q_{N,i},a_1,\cdots,a_k)=F(q_{1,i},\cdots,q_{N,i},a_{1_0},\cdots,a_{k_0})+\sum_{k=1}^{m}\frac{\partial F}{\partial a_k}(a_k-a_{k_0}) \tag{45}$$

と $F(q_{1,i},\cdots,q_{N,i},a_1,\cdots,a_k)$ を a_k の近似値 a_{k_0} の周りに展開する。これを式 (44) に代入して S が最小となる条件から正規方程式を得る。F を式 (45) 右辺の第 1 項とし、

$$\begin{aligned}\langle jk\rangle &= \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\alpha_{1,i}^2}{w_{1,i}}+\cdots+\frac{\alpha_{N,i}^2}{w_{N,i}}\right)^{-1}F_{a_k}F_{a_j} & (46)\\ \langle j0\rangle &= -\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\alpha_{1,i}^2}{w_{1,i}}+\cdots+\frac{\alpha_{N,i}^2}{w_{N,i}}\right)^{-1}FF_{a_j} & (47)\end{aligned}$$

と書き換えれば、式 (25) と同じ次の正規方程式を得る。

$$\left\{\begin{array}{lcll}\langle 11\rangle(a_1-a_{1_0})+ & \cdots & +\langle 1m\rangle(a_m-a_{m_0}) & = \langle 10\rangle\\ & \cdots & & \\ \langle m1\rangle(a_1-a_{1_0})+ & \cdots & +\langle mm\rangle(a_m-a_{m_0}) & = \langle m0\rangle\end{array}\right. \tag{48}$$

（終わり）

2014.10.18 一部修正

2019.12.5 一部修正追加