最小二乗法について

概 要

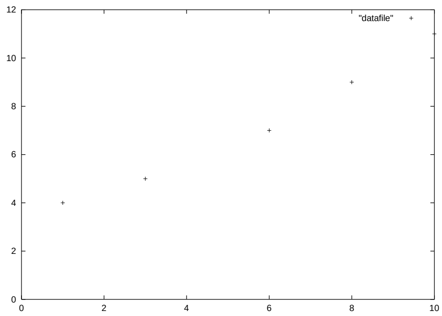
最小二乗法とは得られたデータの組からデータ間の関係を推測する方法です。これは、

- 物理定数の決定や、
- 統計情報による未来予想

などに応用できます。ここではその原理と計算法を説明します。

1　問題の紹介

二つ値の組となるデータ $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \cdots (x_n, y_n)$ が得られたとします。その時、これらのデータの間に $y = ax + b$ という関係が成り立つと仮定して、a, b を求めることを考えます。



もし、得られたデータに誤差が全くないときは、単純に二点を通る直線の式を求めれば良いので、二つのデータの組があれば a と b は求まります。しかし、ここでは誤差があるデータを考えます。つまり、理想的な a, b が得られたとしても、各データに関して正確には

$$y_i = ax_i + b$$

が成り立たないような状況を考えます。この場合、「理想的」とは一体どのような判断になるのでしょうか?

2　最小二乗法の考え方

理想的な a, b が得られたとすると、$y_i = ax_i + b$ は成り立たなくても、両辺はかなり近い値になってます。つまり、

$$y_i - ax_i - b \tag{1}$$

は 0 に近いはずです。そこで、a と b がどれだけ理想に近いかは、各データに関して式 (1) を評価すればよいことになります。ここで、各データに対して式 (1) を二乗したものの合計した値を考えます。

$$f(a,b) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - ax_i - b)^2 \tag{2}$$

得られたデータに対してこの式を最小にする a, b が理想的であると考えます。

3　最小二乗法の計算

ではこの $f(a,b)$ を最小にする a, b はどのようにすれば求まるのでしょうか? これには

1. $f(a,b)$ を a, b で偏微分して、
2. 極値となる a, b を連立方程式を解いて

求めます。

$$\begin{aligned}
f(a,b) &= \sum_{i=1}^{n}(y_i - ax_i - b)^2 \\
&= \sum_{i=1}^{n}(y_i^2 + a^2x_i^2 + b^2 - 2ax_iy_i - 2by_i + 2abx_i) \\
\frac{\partial f}{\partial a} &= \sum_{i=1}^{n}(2ax_i^2 - 2x_iy_i + 2bx_i) \\
&= 2a\sum_{i=1}^{n}x_i^2 - 2\sum_{i=1}^{n}x_iy_i + 2b\sum_{i=1}^{n}x_i \qquad (3) \\
\frac{\partial f}{\partial b} &= \sum_{i=1}^{n}(2b - 2y_i + 2ax_i) \\
&= 2nb - 2\sum_{i=1}^{n}y_i + 2a\sum_{i=1}^{n}x_i \qquad (4)
\end{aligned}$$

式 (3), (4) の値が 0 となる a, b が求まれば、$f(a,b)$ の値は最小になります。整理すると次のようになります。

$$\begin{aligned}
\left(\sum_{i=1}^{n}x_i^2\right)a + \left(\sum_{i=1}^{n}x_i\right)b &= \sum_{i=1}^{n}x_iy_i \\
\left(\sum_{i=1}^{n}x_i\right)a + nb &= \sum_{i=1}^{n}y_i
\end{aligned}$$

この連立方程式を解けば理想的な a, b が求まります。