

NO.

0084

5 点データに対する 2 次関数の最小二乗フィット

$f(x) = ax^2 + bx + c$ は未知パラメータ a, b, c について線形であるから、誤差二乗和

$$S(a, b, c) = \sum_i (y_i - ax_i^2 - bx_i - c)^2$$

は a, b, c の 2 次関数であり、最小値では各偏微分がすべて 0 になる。 a, b, c で偏微分して 0 とおくと

$$\begin{cases} a \sum_i x_i^4 + b \sum_i x_i^3 + c \sum_i x_i^2 = \sum_i x_i^2 y_i \\ a \sum_i x_i^3 + b \sum_i x_i^2 + c \sum_i x_i = \sum_i x_i y_i \\ a \sum_i x_i^2 + b \sum_i x_i + c n = \sum_i y_i \end{cases}$$

という 3 元連立 1 次方程式（正規方程式）が得られる。

$n = 5$ とし、必要な和を計算する。 x_i が原点对称なので $\sum x_i = 0, \sum x_i^3 = 0$ となることに注意すると

$$\sum x_i^2 = 10, \quad \sum x_i^4 = 34, \quad \sum y_i = 12, \quad \sum x_i y_i = 4, \quad \sum x_i^2 y_i = 42$$

正規方程式は

$$34a + 10c = 42, \quad 10b = 4, \quad 10a + 5c = 12$$

第 2 式より直ちに $b = \frac{2}{5}$ 。第 3 式より $c = \frac{12 - 10a}{5}$ を第 1 式に代入すると

$$34a + 10 \cdot \frac{12 - 10a}{5} = 42 \implies 34a + 24 - 20a = 42 \implies 14a = 18 \implies a = \frac{9}{7}$$

このとき

$$c = \frac{12 - 10 \cdot \frac{9}{7}}{5} = \frac{\frac{84-90}{7}}{5} = \frac{-6/7}{5} = -\frac{6}{35}$$

したがって求める 2 次関数は

$$y = \frac{9}{7}x^2 + \frac{2}{5}x - \frac{6}{35}$$

（検算: 予測値は $\hat{y}(-2) = \frac{146}{35}$, $\hat{y}(-1) = \frac{25}{35}$, $\hat{y}(0) = -\frac{6}{35}$, $\hat{y}(1) = \frac{53}{35}$, $\hat{y}(2) = \frac{202}{35}$ となり、残差 $r_i = y_i - \hat{y}(x_i)$ は $\sum r_i = 0$, $\sum x_i r_i = 0$, $\sum x_i^2 r_i = 0$ を満たす（正規方程式の各式に対応）。）