

NO.

0085

計画行列を用いた直線フィットの正規方程式の導出

一般に $f(x) = \sum_{j=0}^m c_j x^j$ (m 次多項式) のフィットは、計画行列 $A \in \mathbb{R}^{n \times (m+1)}$ 、パラメータベクトル $\mathbf{c}$ 、観測ベクトル $\mathbf{y}$ を用いて $\|\mathbf{y} - A\mathbf{c}\|^2$ の最小化に帰着する。直線フィット $f(x) = ax + b$ の場合はこれを $\mathbf{x} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ として考えればよい。

計画行列とパラメータ・観測ベクトルを

$$A = \begin{pmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_n & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

とおくと、 i 番目の行成分により $(A\mathbf{x})_i = ax_i + b$ となるから、誤差二乗和は

$$S(\mathbf{x}) = \|\mathbf{y} - A\mathbf{x}\|^2 = (\mathbf{y} - A\mathbf{x})^\top (\mathbf{y} - A\mathbf{x}) = \mathbf{y}^\top \mathbf{y} - 2\mathbf{x}^\top A^\top \mathbf{y} + \mathbf{x}^\top A^\top A \mathbf{x}$$

と展開できる。これを $\mathbf{x}$ で微分すると

$$\nabla_{\mathbf{x}} S = -2A^\top \mathbf{y} + 2A^\top A \mathbf{x}$$

であり、これを $\mathbf{0}$ とおくことで正規方程式

$$A^\top A \mathbf{x} = A^\top \mathbf{y}$$

を得る。ここで

$$A^\top A = \begin{pmatrix} \sum x_i^2 & \sum x_i \\ \sum x_i & n \end{pmatrix}, \quad A^\top \mathbf{y} = \begin{pmatrix} \sum x_i y_i \\ \sum y_i \end{pmatrix}$$

であるから、成分ごとに書き下すと

$$\sum x_i^2 a + \sum x_i b = \sum x_i y_i, \quad \sum x_i a + n b = \sum y_i$$

となる。

これを $(x_1, y_1) = (0, 1), (1, 2), (2, 2), (3, 4)$ のデータに当てはめる。 $n = 4, \sum x_i^2 = 14, \sum x_i = 6, \sum x_i y_i = 18, \sum y_i = 9$ であるから、成分ごとの式は

$$14a + 6b = 18, \quad 6a + 4b = 9$$

となり、これは偏微分により直接導出した正規方程式と完全に一致する。

(検算: この式を解くと $a = b = \frac{9}{10}$ が得られる。これを $A^\top A \mathbf{x}$ に代入すると

$$A^\top A \mathbf{x} = \begin{pmatrix} 14 \cdot \frac{9}{10} + 6 \cdot \frac{9}{10} \\ 6 \cdot \frac{9}{10} + 4 \cdot \frac{9}{10} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 18 \\ 9 \end{pmatrix} = A^\top \mathbf{y}$$

となり、確かに正規方程式を満たす。)