平成 13 年 7 月 18 日

過剰な連立一次方程式の最小自乗解

新潟工科大学 情報電子工学科 竹野茂治

過剰な連立一次方程式

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b},$$

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x} = {}^T(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad \boldsymbol{b} = {}^T(b_1, b_2, \dots, b_m)$$

$(m > n)$ は、一般には解を持つとは限らない。これの最小自乗解、すなわち自乗誤差

$$Err = \sum_{k=1}^{m} (\boldsymbol{\alpha}_k \boldsymbol{x} - b_k)^2 \quad (\boldsymbol{\alpha}_k = (a_{k1}, a_{k2}, \dots, a_{kn}))$$

を最小にする $\boldsymbol{x}$ を求めることを考える。

命題 1

そのような $\boldsymbol{x}$ がただ一つに決まるのは、A の列ベクトル

$$\boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_2, \dots, \boldsymbol{\beta}_n \quad (\boldsymbol{\beta}_k = {}^T(a_{1k}, a_{2k}, \dots, a_{mk}))$$

が一次独立のとき、そしてそのときのみであり、その場合、そのような $\boldsymbol{x}$ は連立方程式

$${}^TAA\boldsymbol{x} = {}^TA\boldsymbol{b}$$

で与えられる。

証明

一般の場合も同様なので、$n = 2, m = 3$ で行う。方程式を

$$\begin{cases} ax + by = p \\ cx + dy = q \\ ex + fy = r \end{cases}$$

として考える。つまりこの場合

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \\ e & f \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x} = {}^T(x, y), \quad \boldsymbol{b} = {}^T(p, q, r)$$

である。自乗誤差は

$$Err = (ax + by - p)^2 + (cx + dy - q)^2 + (ex + fy - r)^2$$

である。2 変数関数の極大極小の理論により、その最小値を与える停留点は

$$\frac{\partial Err}{\partial x} = \frac{\partial Err}{\partial y} = 0$$

となる点 (x, y) であり、

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial Err}{\partial x} &= 2a(ax+by-p)+2c(cx+dy-q)+2e(ex+fy-r) \\
\frac{\partial Err}{\partial y} &= 2b(ax+by-p)+2d(cx+dy-q)+2f(ex+fy-r)
\end{aligned}
$$

なので、よって、

$$
\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} a(ax+by-p)+c(cx+dy-q)+e(ex+fy-r) \\ b(ax+by-p)+d(cx+dy-q)+f(ex+fy-r) \end{bmatrix} \\
= & \begin{bmatrix} a & c & e \\ b & d & f \end{bmatrix} \begin{bmatrix} ax+by-p \\ cx+dy-q \\ ex+fy-r \end{bmatrix} \\
= & {}^T A(A\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}) = {}^T AA\boldsymbol{x} - {}^T A\boldsymbol{b} \\
= & \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

を満たすものがその停留点となる。

$$
\begin{aligned}
\det({}^T AA) &= \left| \begin{bmatrix} a & c & e \\ b & d & f \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \\ e & f \end{bmatrix} \right| \\
&= \begin{vmatrix} a^2+c^2+e^2 & ab+cd+ef \\ ab+cd+ef & b^2+d^2+f^2 \end{vmatrix} \\
&= (a^2+c^2+e^2)(b^2+d^2+f^2)-(ab+cd+ef)^2 \\
&= (ad-cb)^2+(af-eb)^2+(cf-ed)^2
\end{aligned}
$$

なので、これが 0 になるのは $ad=cb$, $af=eb$, $cf=ed$, すなわち $a:c:e=b:d:f$ となるとき、つまり A の列ベクトル ${}^T(a,c,e)$ と ${}^T(b,d,f)$ が平行であるとき、となる。

それ以外の場合には方程式 ${}^T AA\boldsymbol{x} - {}^T A\boldsymbol{b} = 0$ によって一意に停留点が求まる。■