

5 最小 2 乗法

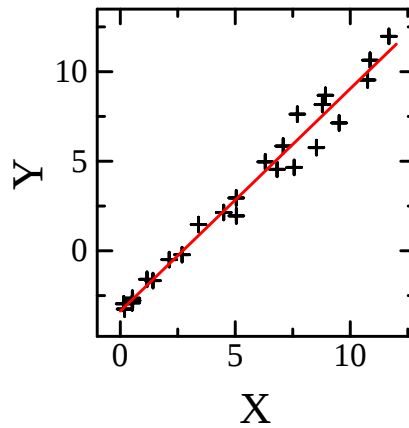
5.1 1 次関数のフィッティング

問題 量 X に対して Y を n 回測定し、 $(X_1, Y_1), (X_2, Y_2), \dots, (X_n, Y_n)$ を得た。 $(X$ には誤差はないとする。) X, Y に

$$Y = a_1 X + a_0 \quad (6)$$

の関係があるとき、 a_0, a_1 を求めるにはどうしたらよいか? また、その分散は?

図 3: データの fitting.



式 (6) の右辺は、 X に対する Y の最確値を与えられ、すなわち

$$Y_i - (a_1 X_i + a_0) = \Delta_i.$$

したがって残差平方和は

$$S = \sum_i^n \{Y_i - (a_1 X_i + a_0)\}^2.$$

S が最小となる条件は、

$$\frac{\partial S}{\partial a_j} = 0, \quad (j = 1, 2).$$

すなわち、

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = -2 \sum_i^n \{Y_i - (a_1 X_i + a_0)\} = 0 \quad (7)$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_1} = -2 \sum_i^n X_i \{Y_i - (a_1 X_i + a_0)\} = 0 \quad (8)$$

これらは、 a_0, a_1 についての 2 元 1 次方程式:

$$\mathbf{M} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_i Y_i \\ \sum_i X_i Y_i \end{pmatrix}$$

ここで、

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} n & \sum_i X_i \\ \sum_i X_i & \sum_i X_i^2 \end{pmatrix}$$

である。この解は、

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\det \mathbf{M}} \begin{pmatrix} \sum_i X_i^2 & -\sum_i X_i \\ -\sum_i X_i & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sum_i Y_i \\ \sum_i X_i Y_i \end{pmatrix}. \quad (9)$$

$$\text{ただし, } \det \mathbf{M} \equiv n (\sum_i X_i^2) - (\sum_i X_i)^2 \quad (10)$$

次に、 a_0, a_1 の誤差を考えよう。 Y の分散を σ^2 とすれば、誤差伝播の法則により、

$$\sigma_{a_j}^2 = \sum_k^n \left(\frac{\partial a_j}{\partial Y_k} \right)^2 \sigma^2. \quad (11)$$

式 (9) で、 $\mathbf{M}$ は Y_k を含まないことに注意すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial Y_k} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} &= \mathbf{M}^{-1} \underbrace{\frac{\partial}{\partial Y_k} \begin{pmatrix} \sum_i Y_i \\ \sum_i X_i Y_i \end{pmatrix}}_{= \begin{pmatrix} 1 \\ X_k \end{pmatrix}} \\ &= \frac{1}{\det \mathbf{M}} \begin{pmatrix} \sum_i X_i^2 - X_k (\sum_i X_i) \\ -(\sum_i X_i) + n X_k \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (12)$$

$$= \frac{1}{\det \mathbf{M}} \begin{pmatrix} \sum_i X_i^2 - X_k (\sum_i X_i) \\ -(\sum_i X_i) + n X_k \end{pmatrix}. \quad (13)$$

これより、

$$\begin{aligned} \sigma_{a_0}^2 &= \frac{\sigma^2}{(\det \mathbf{M})^2} \sum_k \{ \sum_i X_i^2 - X_k (\sum_i X_i) \}^2 \\ &= \frac{\sigma^2}{(\det \mathbf{M})^2} \{ n (\sum_i X_i^2)^2 - 2 (\sum_k X_k) (\sum_i X_i) (\sum_i X_i^2) + (\sum_k X_k^2) (\sum_i X_i)^2 \} \\ &= \frac{\sigma^2 \sum_i X_i^2}{(\det \mathbf{M})^2} \underbrace{\{ n (\sum_k X_k^2) - (\sum_i X_i)^2 \}}_{=\det \mathbf{M}} \\ &= \sigma^2 \frac{\sum_i X_i^2}{\det \mathbf{M}} \\ &= \sigma^2 (\mathbf{M}^{-1})_{11} \quad (\mathbf{M} \text{ の逆行列の 1 行 1 列目の成分の } \sigma^2 \text{ 倍}). \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{a_1}^2 &= \frac{\sigma^2}{(\det \mathbf{M})^2} \sum_k \{ n X_k - (\sum_i X_i) \}^2 \\ &= \frac{\sigma^2}{(\det \mathbf{M})^2} \{ n^2 (\sum_k X_k^2) - 2n (\sum_k X_k) (\sum_i X_i) + n (\sum_i X_i)^2 \} \\ &= \frac{n \sigma^2}{(\det \mathbf{M})^2} \underbrace{\{ n (\sum_k X_k^2) - (\sum_i X_i)^2 \}}_{=\det \mathbf{M}} \\ &= \sigma^2 \frac{n}{\det \mathbf{M}} \\ &= \sigma^2 (\mathbf{M}^{-1})_{22} \quad (\mathbf{M} \text{ の逆行列の 2 行 2 列目成分の } \sigma^2 \text{ 倍}). \end{aligned} \quad (15)$$

以上をまとめる

n 回測定値 $(X_1, Y_1), (X_2, Y_2), \dots, (X_n, Y_n)$ に、 $Y = a_1 X + a_0$ を最小 2 乗法によりフィッティングする場合、

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \mathbf{M}^{-1} \begin{pmatrix} \sum_i Y_i \\ \sum_i X_i Y_i \end{pmatrix} \quad (16)$$

$$\text{ただし} \quad \mathbf{M} = \begin{pmatrix} n & \sum_i X_i \\ \sum_i X_i & \sum_i X_i^2 \end{pmatrix} \quad (17)$$

また、 Y の分散を σ^2 として、 a_0, a_1 の分散は、それぞれ $\mathbf{M}$ の逆行列の (11), (22) 成分の σ^2 倍である。

これまで Y の分散を σ^2 としてきたが、次に分散の推定値を導き出そう。係数 a_0, a_1 が最確値であると考え、残差 Δ_i は

$$\Delta_i = Y_i - (a_1 X_i + a_0) \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (18)$$

である。また、係数の真の値が $a_0 - \delta_0, a_1 - \delta_1$ で与えられるとすると、誤差は

$$y_i = Y_i - \{(a_1 - \delta_1)X_i + (a_0 - \delta_0)\} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (19)$$

である。式 (18,19) より、

$$\Delta_i = y_i - (\delta_1 X_i + \delta_0)$$

したがって、残差平方和は

$$S = \sum_i^n \Delta_i^2 = \sum_i^n \{y_i - (\delta_1 X_i + \delta_0)\}^2 \quad (20)$$

最小 2 乗法の原理により、 δ_0, δ_1 の実現値は

$$\frac{\partial S}{\partial \delta_j} = 0, \quad (j = 1, 2)$$

すなわち、

$$\frac{\partial S}{\partial \delta_0} = -2 \sum_i^n \{y_i - (\delta_1 X_i + \delta_0)\} = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial \delta_1} = -2 \sum_i^n X_i \{y_i - (\delta_1 X_i + \delta_0)\} = 0$$

より求められる。これらは式 (7,8) の Y_i を y_i に a_j を δ_j に置き換えたものであることに注意すると、 δ_j は

$$\begin{pmatrix} \delta_0 \\ \delta_1 \end{pmatrix} = \mathbf{M}^{-1} \begin{pmatrix} \sum_i y_i \\ \sum_i X_i y_i \end{pmatrix} \quad (21)$$

あるいは、

$$\delta_{k-1} = \sum_{j=1}^2 (\mathbf{M}^{-1})_{kj} \sum_h^n X_h^{j-1} y_h \quad (k = 1, 2) \quad (22)$$

とかける。これを式 (20) に代入すると、

$$S = \sum_i^n \left(y_i - \sum_k^2 \delta_{k-1} X_i^{k-1} \right)^2 \quad (23)$$

$$= \sum_i^n \left\{ y_i - \sum_{j,k=1}^2 (\mathbf{M}^{-1})_{kj} \left(\sum_h^n X_h^{j-1} y_h \right) X_i^{k-1} \right\}^2 \quad (24)$$

$$= \sum_i^n y_i^2 - 2 \sum_{j,k=1}^2 (\mathbf{M}^{-1})_{kj} \left(\sum_h^n X_h^{j-1} y_h \right) \left(\sum_i^n X_i^{k-1} y_i \right) \\ + \sum_{j,k,j',k'=1}^2 (\mathbf{M}^{-1})_{kj} (\mathbf{M}^{-1})_{k'j'} \left(\sum_i^n X_i^{k+k'-2} \right) \left(\sum_h^n X_h^{j-1} y_h \right) \left(\sum_g^n X_g^{j'-1} y_g \right). \quad (25)$$

ここで、

$$E(y_g y_h) = \sigma^2 \delta_{gh} \quad \left(\delta_{gh} = \begin{cases} 1 & g = h \\ 0 & g \neq h \end{cases} \right) \quad (26)$$

に注意して、式 (25) 両辺の期待値を計算する。

$$E(S) = n\sigma^2 - 2 \sum_{j,k=1}^2 (\mathbf{M}^{-1})_{kj} \underbrace{\sum_{ih}^n X_h^{j-1} X_i^{k-1} \delta_{hi} \sigma^2}_{=\sigma^2 \sum_i X_i^{j+k-2} = \sigma^2 \mathbf{M}_{jk}} \\ + \sum_{j,k,j',k'=1}^2 (\mathbf{M}^{-1})_{kj} (\mathbf{M}^{-1})_{k'j'} \underbrace{\sum_i^n X_i^{k+k'-2}}_{=\mathbf{M}_{kk'}} \underbrace{\sum_{g,h}^n X_h^{j-1} X_g^{j'-1} \delta_{gh} \sigma^2}_{=\sigma^2 \sum_g X_g^{j+j'-2} = \sigma^2 \mathbf{M}_{jj'}} \\ = (n-2)\sigma^2 \quad (27)$$

最後の行への計算では $\sum_{j,k=1}^2 (\mathbf{M}^{-1})_{jk} \mathbf{M}_{kj} = \sum_{j=1}^2 \delta_{jj} = 2$, $\sum_{j=1}^2 (\mathbf{M}^{-1})_{kj} \mathbf{M}_{jj'} = \delta_{kj'}$, $\sum_{k'=1}^2 (\mathbf{M}^{-1})_{k'j'} \mathbf{M}_{kk'} = \delta_{j'k}$ を用いた。この結果:

$$E\left(\frac{S}{n-2}\right) = \sigma^2 \quad (28)$$

(不偏推定値の定義!!) であるから、 $S/(n-2)$ が母分散の不偏推定値である。

この結果をまとめよう、

測定値の分散の不偏推定値は

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\sum_i^n \Delta_i^2}{n-2} = \frac{\sum_i^n \{Y_i - (a_1 X_i + a_0)\}^2}{n-2} \quad (29)$$

ここで、 $n-2$ は自由度である。(n は測定回数、未知量の数は 2 である。)

これより、

最確値 a_j の不偏分散は

$$\hat{\sigma}_{a_0}^2 = \frac{\sum_i^n \Delta_i^2}{(n-2)} (\mathbf{M}^{-1})_{11} \quad (30)$$

$$\hat{\sigma}_{a_1}^2 = \frac{\sum_i^n \Delta_i^2}{(n-2)} (\mathbf{M}^{-1})_{22} \quad (31)$$

5.2 例題

量 X に対して量 Y を 10 回測定し、次の結果をえた。等精度測定であるとして、 $Y = aX + b$ を測定結果にフィットし、係数とその標準偏差をもとめよ。また、測定値とともにグラフにせよ。

X	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Y	5.2	4.8	6.5	9.1	10.9	12.6	11.9	13	14.1	17

解

	X	Y	X^2	XY	$aX+b$	$Y-(aX+b)$	$[Y-(aX+b)]^2$
	1	5.2	1	5.2	4.676	0.524	0.274
	2	4.8	4	9.6	5.973	-1.173	1.375
	3	6.5	9	19.5	7.269	-0.769	0.592
	4	9.1	16	36.4	8.565	0.535	0.286
	5	10.9	25	54.5	9.862	1.038	1.078
	6	12.6	36	75.6	11.158	1.442	2.079
	7	11.9	49	83.3	12.455	-0.555	0.308
	8	13	64	104	13.751	-0.751	0.564
	9	14.1	81	126.9	15.047	-0.947	0.897
	10	17	100	170	16.344	0.656	0.431
和	$A = 55$	$B = 105.1$	$C = 385$	$D = 685$			7.883
データ個数	$n = 10$						0.985
未知数の個数	$m = 2$						0.993
$\det \mathbf{M} =$	825						

$\leftarrow$ 残差平方和₂
 $\leftarrow \hat{\sigma}^2 = \frac{\sum_i \Delta_i}{n-m}$
 $\leftarrow \hat{\sigma}$

$$\det M = n \sum_i X_i^2 - \left(\sum_i X_i \right)^2 = nC - A^2$$

$$a = \left(n \sum_i X_i Y_i - \sum_i X_i \sum_i Y_i \right) / \det \mathbf{M} = (nD - AB) / \det \mathbf{M}$$

$$b = \left(- \sum_i X_i \sum_i X_i Y_i + \sum_i X_i^2 \sum_i Y_i \right) / \det \mathbf{M} = (-AD + BC) / \det \mathbf{M}$$

$$(\mathbf{M}^{-1})_{11} = n / \det \mathbf{M}$$

$$(\mathbf{M}^{-1})_{22} = \sum_i X_i^2 / \det \mathbf{M} = C / \det \mathbf{M}$$

