最小 2 乗法

谷内仁美

2010/11/29

1 最小 2 乗法

1.1 最小二乗法とは

最小二乗法は残差の二乗和が最小になるように各係数を求める方式である.
具体的には、残差 2 乗和を各係数で偏微分した式を=0 とした連立方程式を立てて解く.

式で書くと
残差は

$$\epsilon_i = (y_i - f(x_i)) \tag{1}$$

より

$$S = \sum_i^n \epsilon_i^2 \tag{2}$$

を最小化するということ.

1.2 Gaussian fitting

ガウス関数は x_c を中心として

$$G(x) = N \exp(-\frac{(x - x_c)^2}{2\sigma^2}) \tag{3}$$

という式で与えられる. このままでの fitting は難しいので、データ、ガウス関数ともに対数をとる. ガウス関数は

$$\ln G(x) = \ln N + (-\frac{(x - x_c)^2}{2\sigma^2}) \tag{4}$$

これは 2 次関数とみることができるので

$$\ln G(x) = ax^2 + bx + c \tag{5}$$

と書くことができる. 係数 a,b,c は、最小二乗法により得られ、それらから N,x_c,σ^2 を求めることができ,

$$x_c = -\frac{b}{2a} \tag{6}$$

$$N = \exp(c - \frac{b^2}{4a}) \tag{7}$$

$$\sigma^2 = -\frac{1}{2a} \tag{8}$$

となる.

1.3 係数を求める

$$\frac{\partial S}{\partial a} = 0 \tag{9}$$

$$\frac{\partial S}{\partial a} = 0 \tag{10}$$

$$\frac{\partial S}{\partial a} = 0 \tag{11}$$

$$\tag{12}$$

より

$$\sum_i^n y_i x_i^2 = a \sum_i^n x_i^4 + b \sum_i^n x_i^3 + c \sum_i^n x_i^2 \tag{13}$$

$$\sum_i^n y_i x_i = a \sum_i^n x_i^3 + b \sum_i^n x_i^2 + c \sum_i^n x_i \tag{14}$$

$$\sum_i^n y_i = a \sum_i^n x_i^2 + b \sum_i^n x_i + \sum_i^n c \tag{15}$$

$$\tag{16}$$

これは

$$\begin{pmatrix} \sum_i^n x_i^4 & \sum_i^n x_i^3 & \sum_i^n x_i^2 \\ \sum_i^n x_i^3 & \sum_i^n x_i^2 & \sum_i^n x_i \\ \sum_i^n x_i^2 & \sum_i^n x_i & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_i^n y_i x_i^2 \\ \sum_i^n y_i x_i \\ \sum_i^n y_i \end{pmatrix} \tag{17}$$

と書けて、

$$A = \begin{pmatrix} \sum_i^n x_i^4 & \sum_i^n x_i^3 & \sum_i^n x_i^2 \\ \sum_i^n x_i^3 & \sum_i^n x_i^2 & \sum_i^n x_i \\ \sum_i^n x_i^2 & \sum_i^n x_i & n \end{pmatrix} \tag{18}$$

とすると、$detA \neq 0$ ならば A の逆行列が求まるので、a, b, c は求められる。