最小二乗法の今と昔

--最小二乗法の歴史と新しい反復解法--

速水　謙（情報学プリンシプル研究系）

Yin Jun-Feng (Tongji University)

NII Open House 2008 .6.5

あらまし

- 最小二乗法とは？
- 最小二乗法の発見
- 最小二乗法の応用
- 最小二乗問題の反復解法

最小二乗法とは？

連立一次方程式

$$
\begin{cases}
2x+3y=5 & \cdots(1) \\
3x-y=2 & \cdots(2)
\end{cases}
$$

連立一次方程式の解法

$$\begin{cases} 2x+3y=5 & \cdots(1) \\ 3x-y=2 & \cdots(2) \end{cases}$$

（ガウス）の消去法

$\Downarrow$

連立一次方程式の解法

$$\begin{cases} 2x + 3y = 5 & \cdots (1) \\ 3x - y = 2 & \cdots (2) \end{cases}$$

（ガウス）の消去法

$$\Downarrow$$

解　　$x = 1, y = 1$

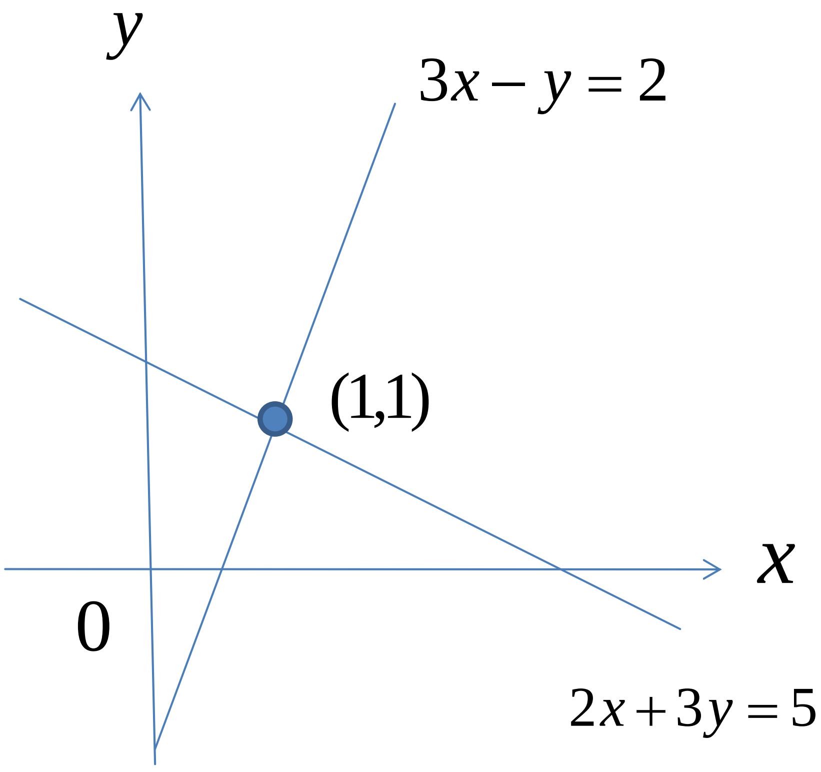
連立一次方程式の幾何学的解釈

$$\begin{cases} 2x+3y=5 & \cdots(1) \\ 3x-y=2 & \cdots(2) \end{cases}$$

（ガウスの）消去法

⇓

解　$x=1,\ y=1$



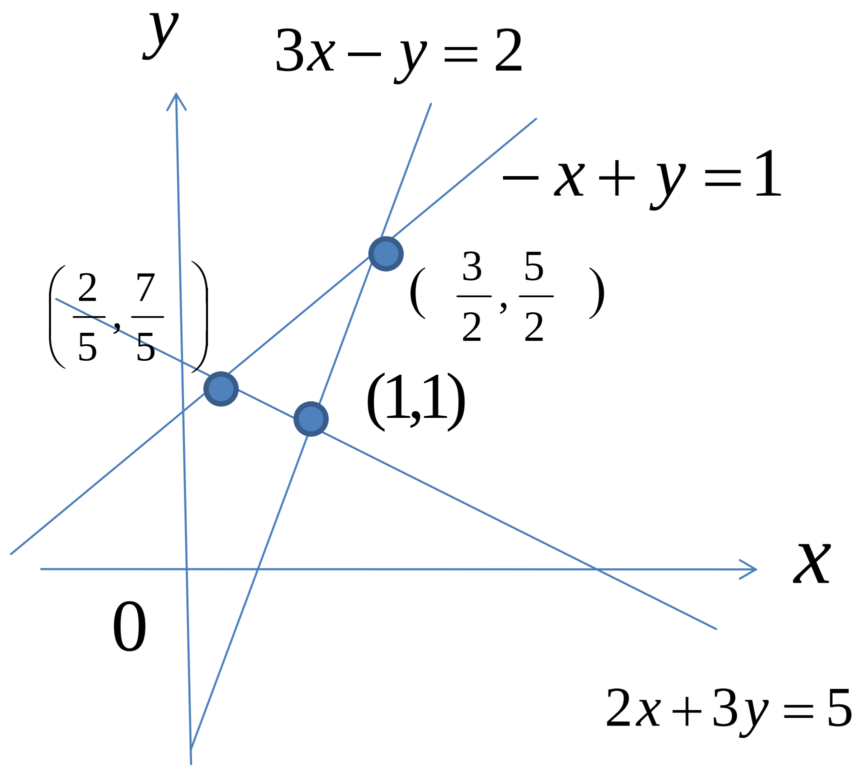
未知数の個数よりも式の数が多い場合は？

$$\begin{cases} 2x+3y=5 & \cdots (1) \\ 3x-y=2 & \cdots (2) \\ -x+y=1 & \cdots (3) \end{cases}$$

未知数の個数よりも式の数が多い場合は？

$$\begin{cases} 2x+3y=5 \cdots (1) \\ 3x-y=2 \cdots (2) \\ -x+y=1 \cdots (3) \end{cases}$$

解は存在しない



最小二乗法

$$\begin{cases} 2x + 3y = 5 \quad \cdots \quad (1) \\ 3x - y = 2 \quad \cdots \quad (2) \\ -x + y = 1 \quad \cdots \quad (3) \end{cases}$$

残差の二乗を最小化

$$(2x + 3y - 5)^2 + (3x - 3y - 2)^2 + (-x + y - 1)^2$$

$$\Downarrow$$

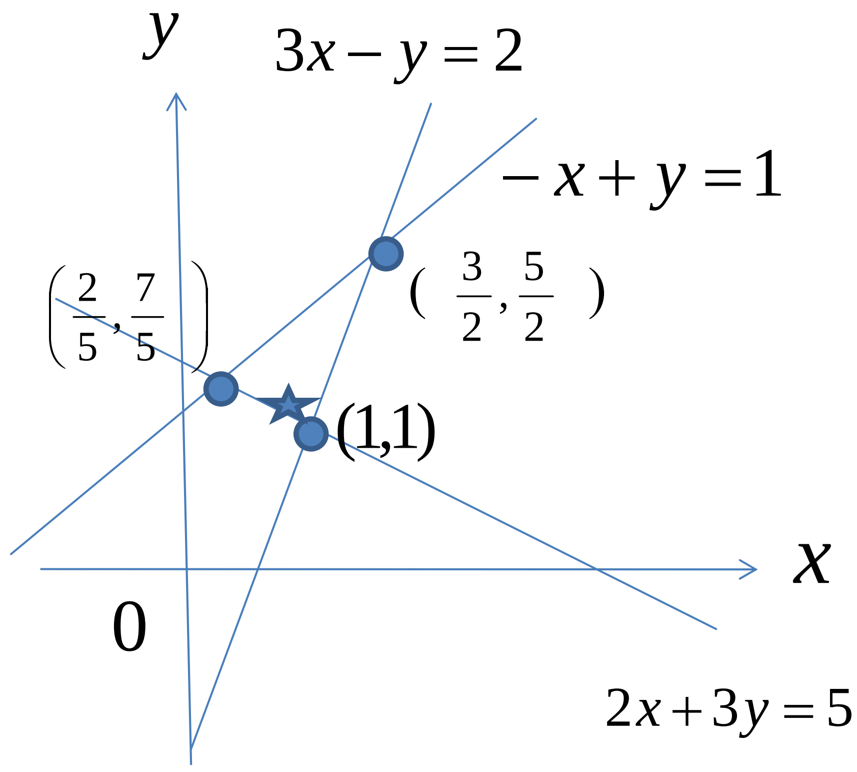
最小化

最小二乗解

$$\begin{cases} 2x+3y=5 \ \cdots (1) \\ 3x-y=2 \ \cdots (2) \\ -x+y=1 \ \cdots \ (3) \end{cases}$$

最小二乗解 ★

$$\left(\frac{137}{150},\frac{83}{75}\right) \cong (0.913, 1.11)$$



最小二乗解の求め方

$$f(x,y) = (2x+3y-5)^2 + (3x-3y-2)^2 + (-x+y-1)^2$$ が最小

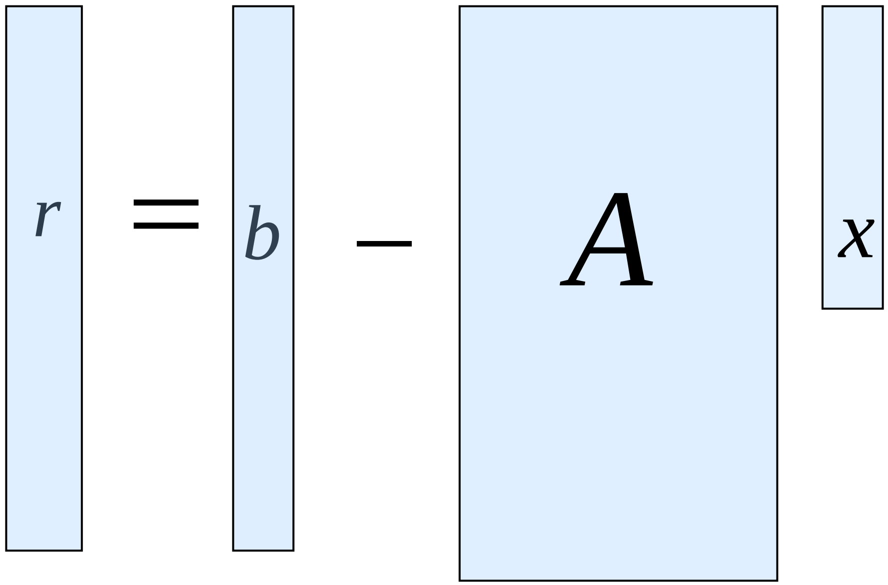
$$\frac{\partial f}{\partial x} = 0 \iff 14x + 2y = 5$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = 0 \iff 2x + 11y = 14$$

最小二乗解

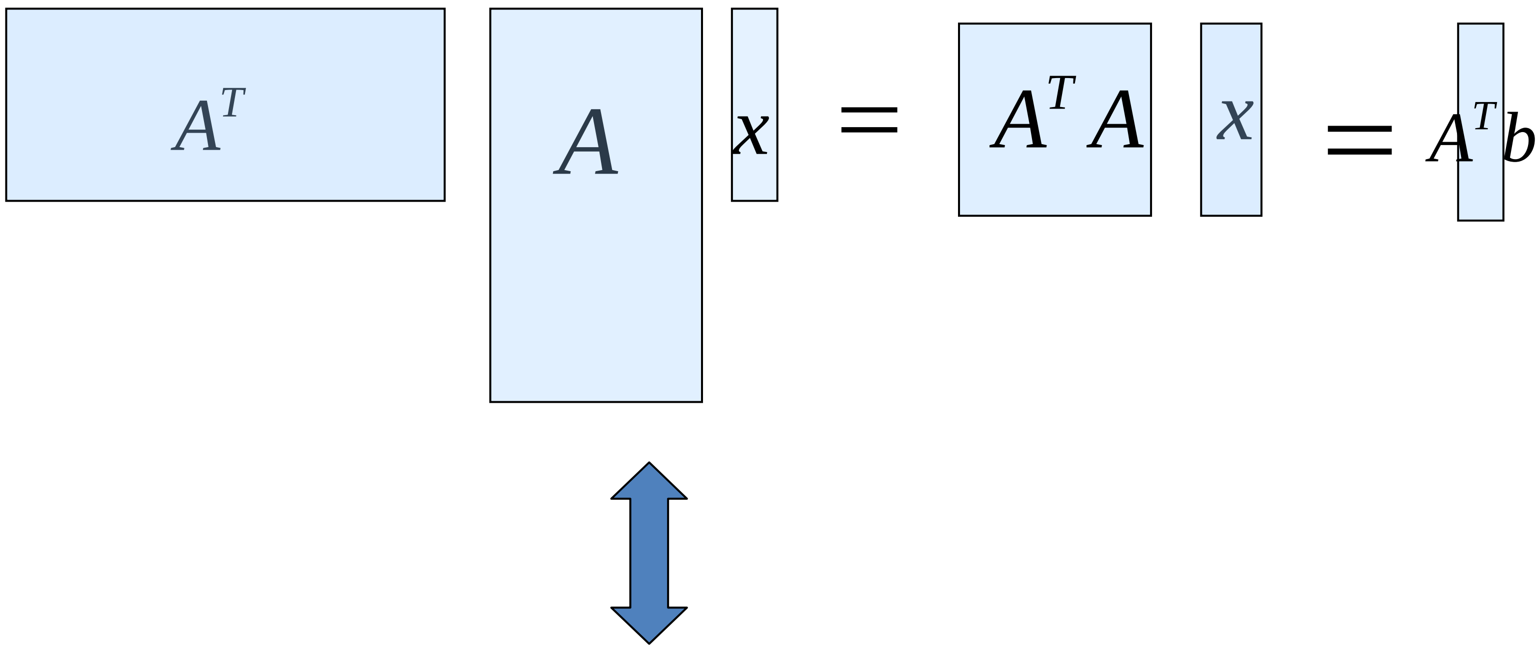
$$(x,y) = \left(\frac{137}{150}, \frac{83}{75}\right) \cong (0.913, 1.11)$$

一般には



$\| r \|_2^2 = r^T r$ の最小化（最小二乗問題）

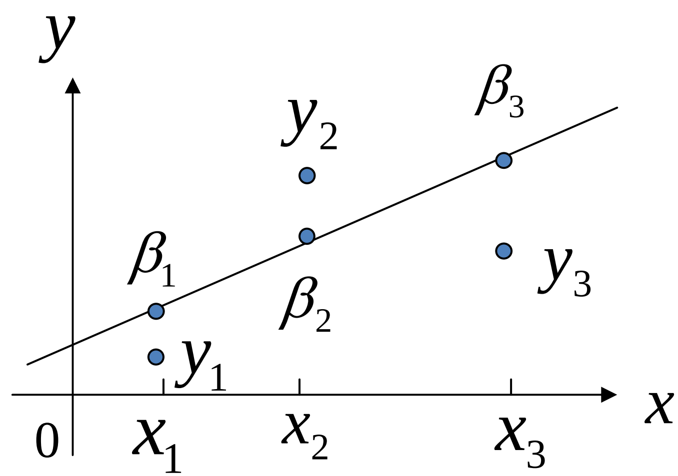
正規方程式 (連立一次方程式)



最小二乗解： $x = (A^T A)^{-1} A^T b$

なぜ二乗か？

$\beta_i = ax_i + b$,　観測値 y_i



確率

$$P(0 \le y_i - \beta_i \le \Delta y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(y_i - \beta_i)^2}{2\sigma^2}} \Delta y$$

同時確率

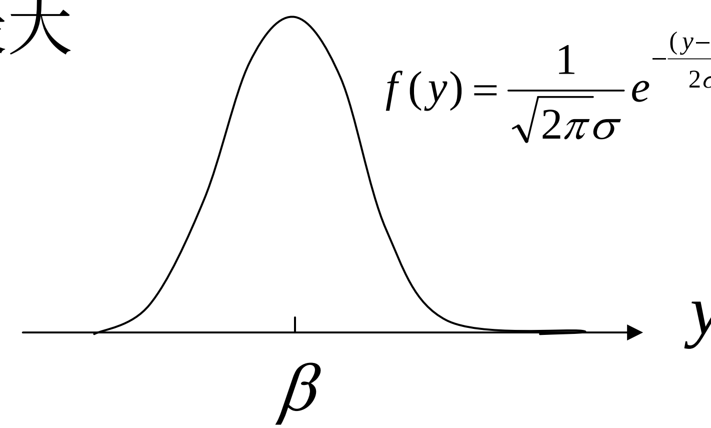
$$\left(\frac{\Delta y}{\sqrt{2\pi}\sigma} \right)^3 \prod_{i=1}^{3} e^{-\frac{(y_i-\beta_i)^2}{2\sigma^2}} = \left(\frac{\Delta y}{\sqrt{2\pi}\sigma} \right)^3 e^{-\frac{\sum_{i=1}^{3}(y_i-\beta_i)^2}{2\sigma^2}} \to 最大$$

$$\Updownarrow$$

$$\sum_{i=1}^{3} (y_i - \beta_i)^2 \to 最小$$

ガウス分布

$$f(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(y-\beta)^2}{2\sigma^2}}$$



(文献[1] Abdulle, Wanner)

最小二乗法の応用

実験、観測データの解析

$$ax_1 + b = y_1 + \varepsilon_1$$

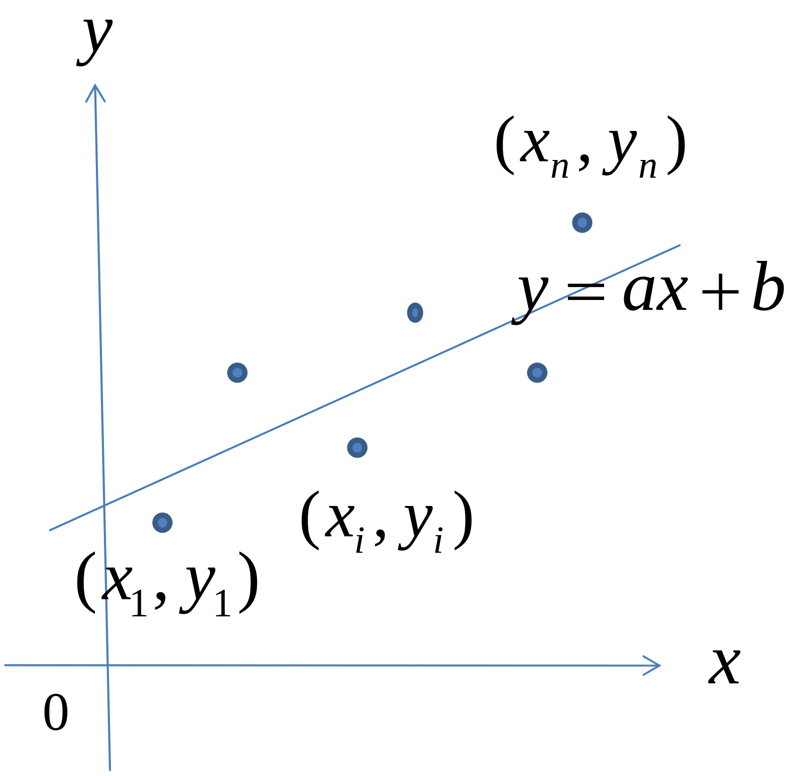
$$ax_2 + b = y_2 + \varepsilon_2$$

$$\vdots$$

$$ax_n + b = y_n + \varepsilon_n$$

誤差の二乗和を最小にする。

$$\sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (ax_i + b - y_i)^2 \to \text{最小}$$



最小二乗法の発見

- ラプラスが「最小一乗法」を発表（１７９９）
- ガウスが小惑星Ceresの軌道予測（１８０１）
  - 1801年1月1日,イタリアの天文学者Piazziが発見,2月11日まで追跡
  - 9月にガウスが軌道を計算,予測,12月7日に予測通りに再発見
  - その後最小二乗法を用いて軌道を精密に計算
- ルジャンドル,最小二乗法を発表（１８０５）
- ガウス,最小二乗法の原理を説明（１８０９）

1795年に発見したと主張。「なぜ二乗か？」をガウス分布を用いて説明。

（ガウスの消去法にも言及。）　ルジャンドルの反論

- ガウス,最小二乗法の論文を発表（１８２３）

ガウス分布に限らず一般の誤差分布に対する最適性を示す。

Pierre-Simon Laplace
(1749-1827)

フランスの数学者
天体力学,確率論,微分方程式論などに貢献
「ラプラス変換」

Carl Friedrich Gauss
（１７７７－１８５５）
ドイツの数学者

ガウスによる小惑星Ceresの軌道予測

1801	Longitude	Latitude		Longitude	Latitude
Jan. 1	$53^0\ 23'\ 06.38''$	$3^0\ 06'\ 45.16''$	23	$53^0\ 44'\ 12.46''$	$1^0\ 38'\ 46.78''$
2	$53^0\ 19'\ 38.18''$	$3^0\ 02'\ 26.46''$	28	$54^0\ 15'\ 18.52''$	$1^0\ 21'\ 04.92''$
3	$53^0\ 16'\ 37.70''$	$2^0\ 58'\ 08.04''$	30	$54^0\ 30'\ 10.52''$	$1^0\ 14'\ 14.24''$
4	$53^0\ 14'\ 21.44''$	$2^0\ 53'\ 51.98''$	31	$54^0\ 38'\ 05.58''$	$1^0\ 10'\ 51.02''$
10	$53^0\ 07'\ 57.64''$	$2^0\ 28'\ 53.64''$	Feb. 1	$54^0\ 46'\ 27.14''$	$1^0\ 07'\ 34.18''$
13	$53^0\ 10'\ 05.60''$	$2^0\ 16'\ 46.08''$	2	$54^0\ 55'\ 01.52''$	$1^0\ 04'\ 18.10''$
14	$53^0\ 11'\ 54.20''$	$2^0\ 12'\ 54.02''$	5	$55^0\ 22'\ 45.20''$	$0^0\ 54'\ 34.54''$
19	$53^0\ 26'\ 01.98''$	$1^0\ 53'\ 37.82''$	8	$55^0\ 53'\ 04.52''$	$0^0\ 45'\ 08.28''$
21	$53^0\ 34'\ 22.68''$	$1^0\ 46'\ 13.06''$	11	$56^0\ 26'\ 28.20''$	$0^0\ 35'\ 55.02''$
22	$53^0\ 39'\ 11.58''$	$1^0\ 42'\ 28.80''$			

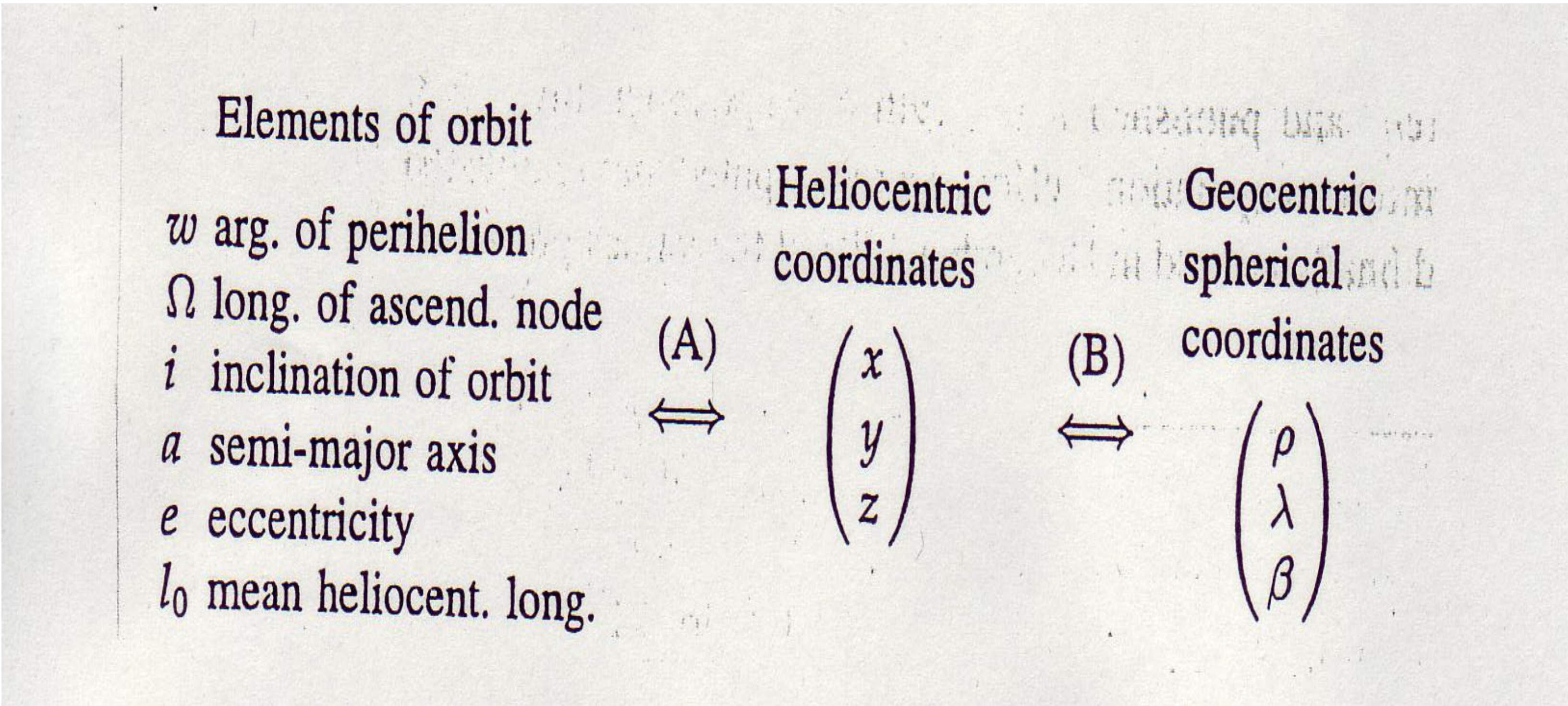
Table 1.1 The observations of Piazzi

Sonnenferne	$326^0\ 53'\ 50''$
Ω	$81^0\ 1'\ 44''$
Neigung der Bahn	$10^0\ 36'\ 21''$
Logarithmus der halben grossen Axe	0.4414902
Excentricität	0.0819603
Epoche: 31 Dec. 1800 mittl. helioc. Länge	$77^0\ 54'\ 29''$

Table 1.2 The elements of Ceres (Gauss Dec. 1801)

(文献[1] Abdulle, Wanner)

ガウスの予測法



Kepler の法則と非線形方程式 の解法

↓

後に非線形最小二乗法 (*Gauss* – *Newton* 法)を用いる

(文献[1] Abdulle, Wanner)

Adrien - Marie Legendre
(1752 -1833)

フランスの数学者。
統計学、数論、代数学、解析学に貢献

最小二乗法の測地学への応用（ガウス）

子午線上の測地データをもとに地球の楕円度を計算．（１７９９）

（子午線の四分円の一千万分の一
:1 メートルの最初の定義に用いた）

D : *Dunkirk*
P : *Paris*(*Pantheon*)
E : *Evaux*
C : *Carcassone*
B : *Barcelona*

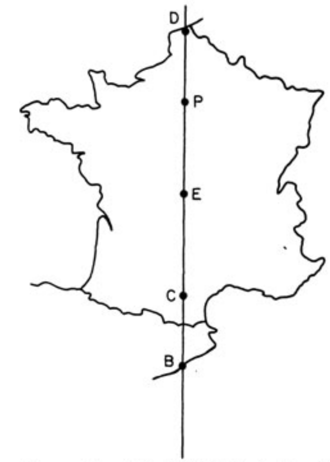


Fig. 1. *The French meridian arc, through Dunkirk* (D), *the Pantheon* (P) *in Paris, Evaux* (E), *Carcassone* (C), *and Barcelona* (B).

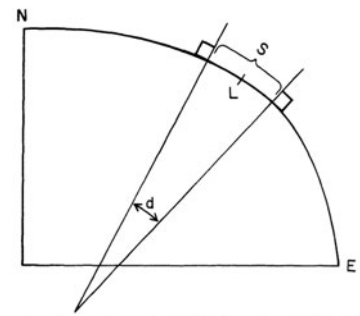
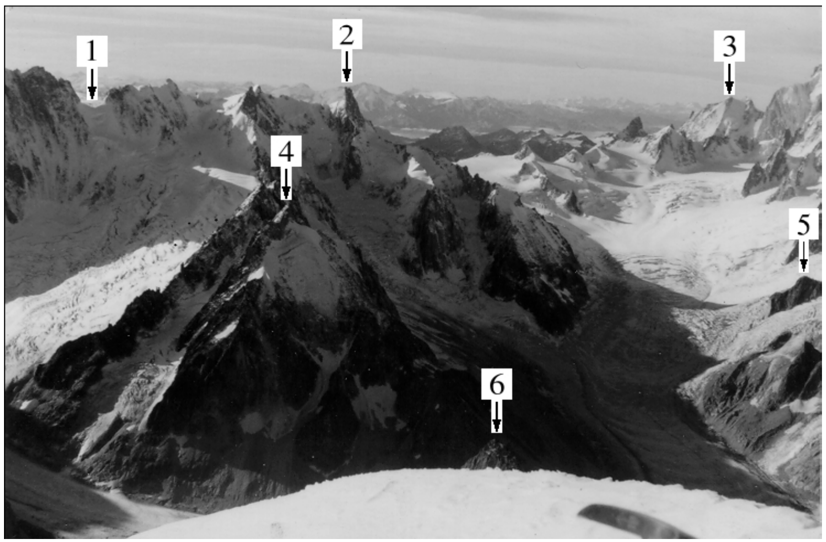


Fig. 2. *A meridian quadrant, from the equator* (E) *to the north pole* (N), *showing an arc segment of* d *degrees latitude and length* S *modules, centered at latitude* L.

(文献[2], *Stigler*)

最小二乗法の応用(1)



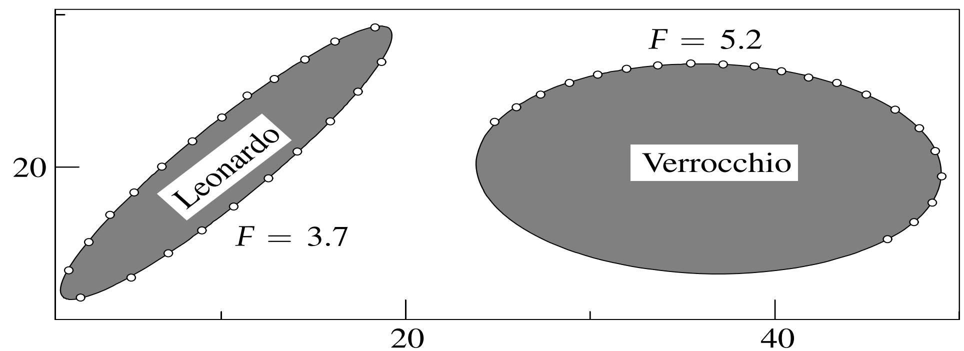
k	$\widehat{u}_k$	$\widehat{v}_k$	x_k	y_k	z_k
1. Col des Grandes Jorasses	−0.0480	0.0290	9855	5680	3825
2. Aiguille du Géant	−0.0100	0.0305	8170	5020	4013
3. Aig. Blanche de Peuterey	0.0490	0.0285	2885	730	4107
4. Aiguille du Tacul	−0.0190	0.0115	8900	7530	3444
5. Petit Rognon	0.0600	−0.0005	5700	7025	3008
6. Aiguille du Moine	0.0125	−0.0270	8980	11120	3412

Table 4.1 The data for the camera problem (in meters)

カメラの位置、方向の同定

(文献[1] Abdulle, Wanner)

最小二乗法の応用(2)



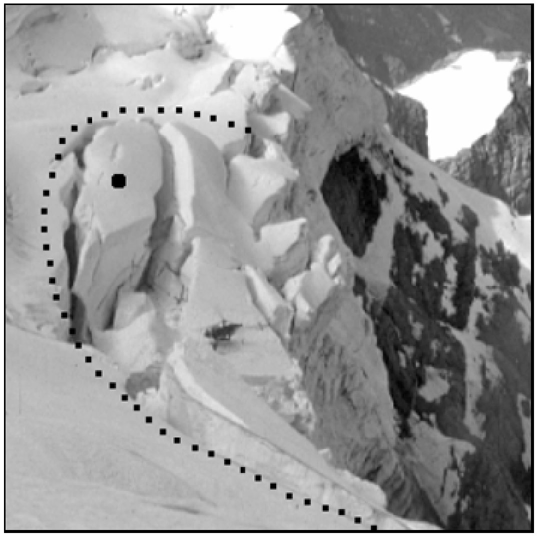
曲線のあてはめ

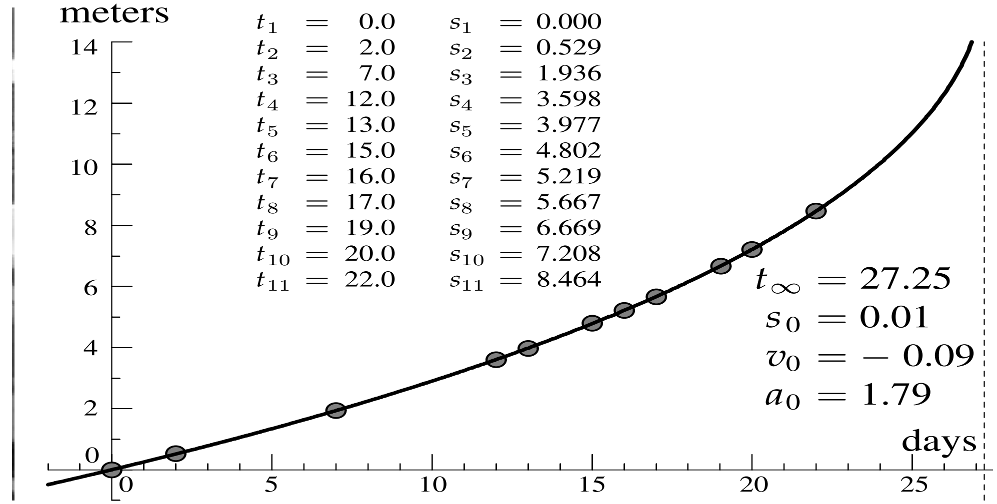
$$F = \sum_i (Ax_i^2 + 2Bx_i y_i + Cy_i^2 - Dx_i - Ey_i - 1)^2 = \min$$

ダビンチは師を越えた ？

(文献[1] Abdulle, Wanner)

最小二乗法の応用(3)





氷河雪崩の予測

雪崩の速さ（経験式）

$$v(t) = v_0 + \frac{a_0}{(t_\infty - t)^n}, \qquad n \approx \frac{1}{2}$$

雪崩の位置

$$s(t) = s_0 + v_0 t + a_0 \left(\frac{(t_\infty - t)^{1-n} - t_\infty^{1-n}}{n-1} \right)$$

Grindelwald

$t = 0$:1999.7.18, 7*am*

予測 :1999.8.14, 1*pm*

実際 :1999.8.14, 2*am*

(文献 [1] Abdulle，Wanner)

最小二乗問題の数値計算法

- **直接法**

  QR**法**(Golub, 1965)

  (Givens(1958), Householder(1958),

  修正Gramm-Schmidt**法**

  (Laplace(1820)…)

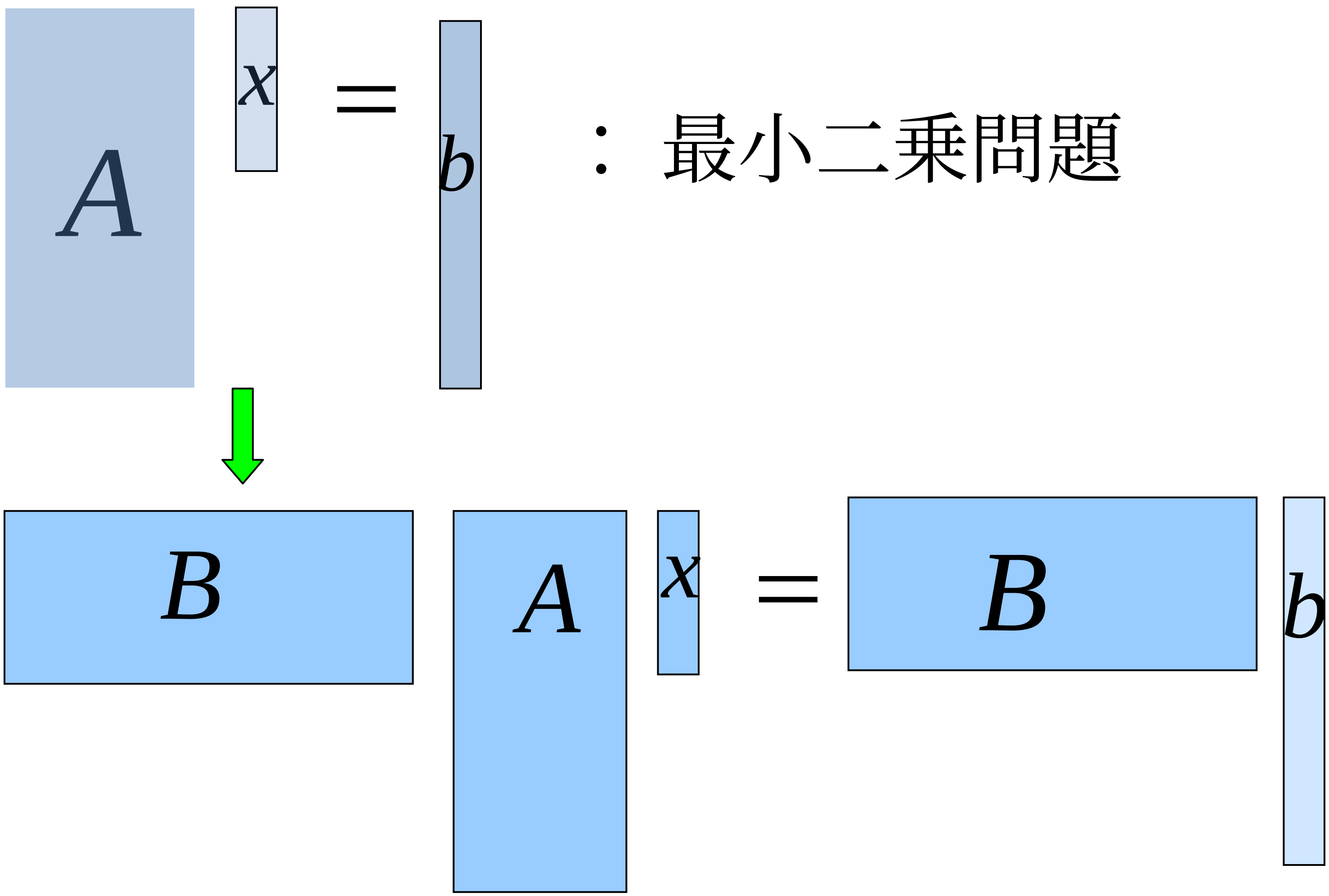
- **反復法** $x_1 \to x_2 \to \cdots \to x_n$

「（ガウスの）消去法 とは違い、反復法（ガ ウス・ザイデル法）は半ば眠っていても計算 できる。」（ガウス）

CGLS**法**(Hestenes, Stiefel,1952),

LSQR**法**(Paige,Saunders,1982)

新しい反復解法



BA法

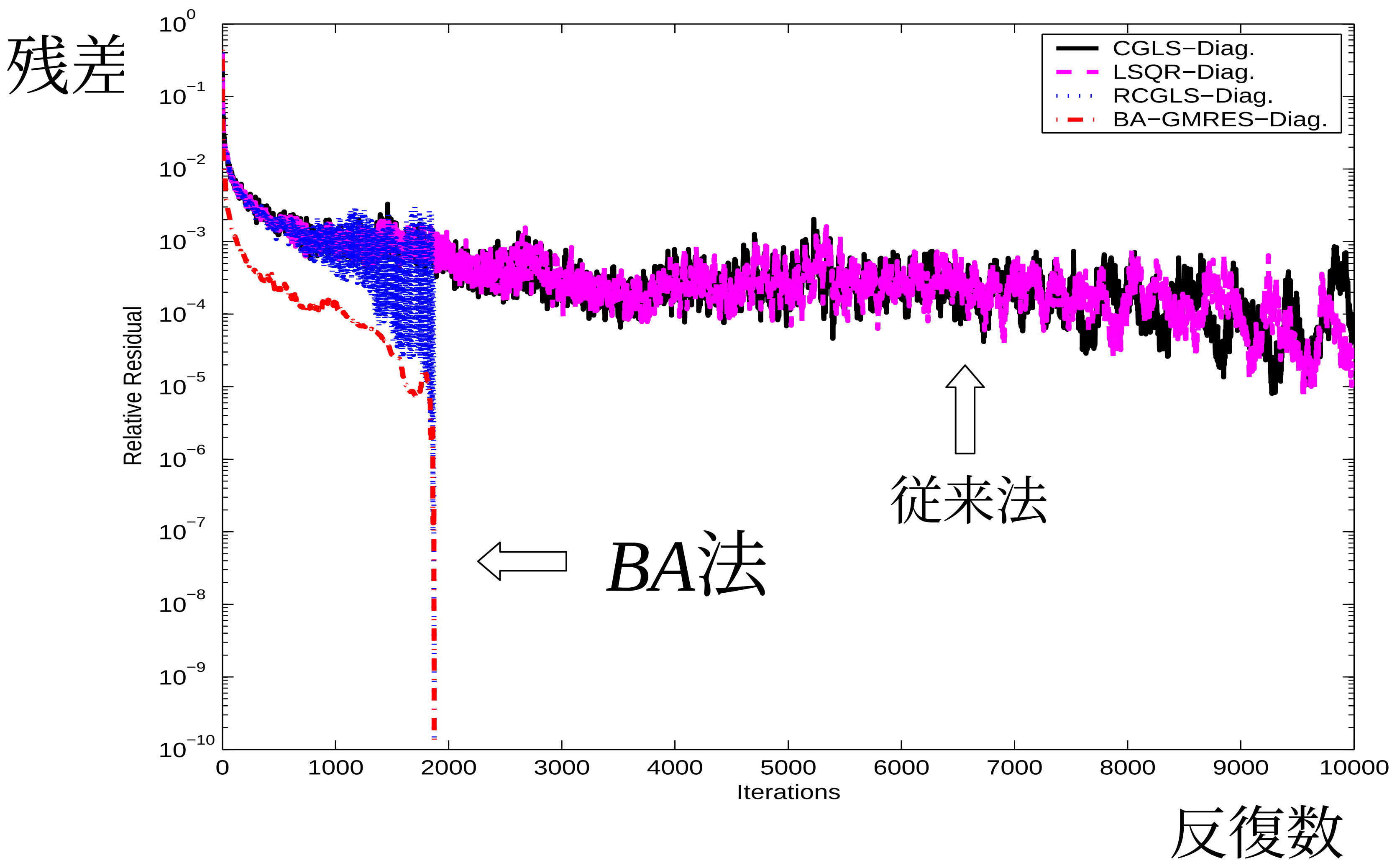
$BAx = Bb$ ：連立一次方程式

反復法を適用

反復法（*GMRES*法：一般化最小残差法)と

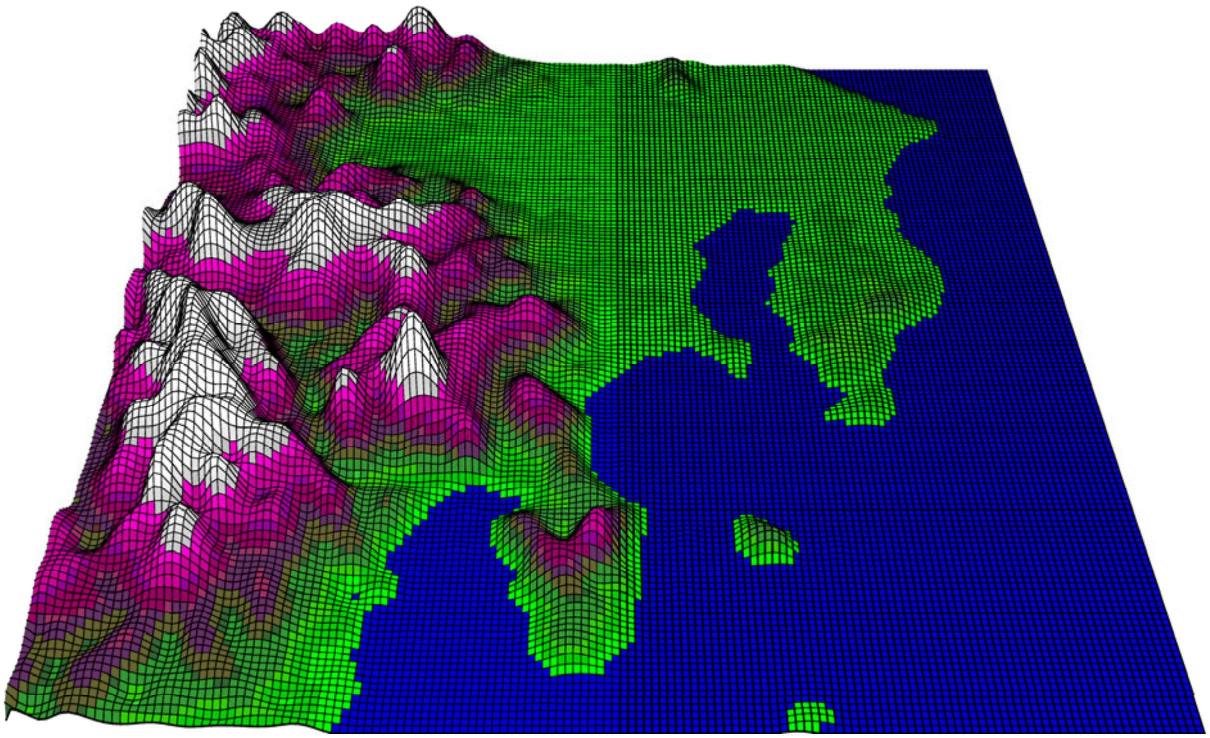
B（前処理行列：RIF法）の選び方がみそ!

BA法と従来法の比較



残差
Relative Residual
10^{0}
10^{-1}
10^{-2}
10^{-3}
10^{-4}
10^{-5}
10^{-6}
10^{-7}
10^{-8}
10^{-9}
10^{-10}
CGLS−Diag.
LSQR−Diag.
RCGLS−Diag.
BA−GMRES−Diag.
従来法
BA法
0
1000
2000
3000
4000
5000
6000
7000
8000
9000
10000
Iterations
反復数

BA法の最小二乗問題への適用例



スプラインを用いた地形データの補間 (NII, **橋爪教授作成**)

未知数(パラメータ)：3,969**個**, **方程式(標高データ)**: 64,009**個**

まとめ

- 最小二乗法とは？
- 最小二乗法の発見
- 最小二乗法の応用
- 新しい反復解法

関連発表

- NII市民講座
  “数学者”ガウスに学ぶ
  社会に生きる数学
  速水 謙 (2008.2.12)
  http://www.nii.ac.jp/shimin/

- ポスター展示 ６０３ (大学院（総研大）)
  最小二乗問題の新しい反復解法
  Generalized Approximate Inverse Preconditioners
  for Least Squares Problems
  (最小二乗問題のための一般化近似逆行列前処理)
  Cui Xiaoke, 速水 謙

参考文献

[1] A. Abdulle and G. Wanner, 200 years of least squares method, *Elemente der Mathematik*, 57 (2002), 45-60.

[2] S. Stigler, Gauss and the invention of least squares, *The Annals of Statistics*, 9, No.3 (1981), 465-474.

[3] **速水 謙**, **伊藤 徳史**, GMRES**法による最小二乗問題の解法**, **統計数理**, 53, No. 2 (2005), 331-348.

[4] K. Hayami, J.-F. Yin and T. Ito, GMRES methods for least squares problems, *NII Technical Reports*, NII-2007-09E (2007), 1-29.