クレジット:
Mathematics and Informatics Center 文科系のための線形代数・解析Ⅱ
2020 藤堂 眞治・松尾 泰・藤原 毅夫



東京大学
THE UNIVERSITY OF TOKYO

# 最小二乗解　（グラム行列）

行列 $A$に対して実ベクトル $\mathbf{b}$ が与えられたとする．

このとき

$J=\| A\mathbf{x}-\mathbf{b} \|^2 \equiv {}^t(A\mathbf{x}-\mathbf{b})(A\mathbf{x}-\mathbf{b})$

を最小にするように $\mathbf{x}$ を決める問題を考えよう．これを最小二乗問題といい，最小２乗法と同等の問題である．

今の場合，最小二乗問題の解 $\mathbf{x}'$ は

${}^tAA\mathbf{x}'={}^tA\mathbf{b}$

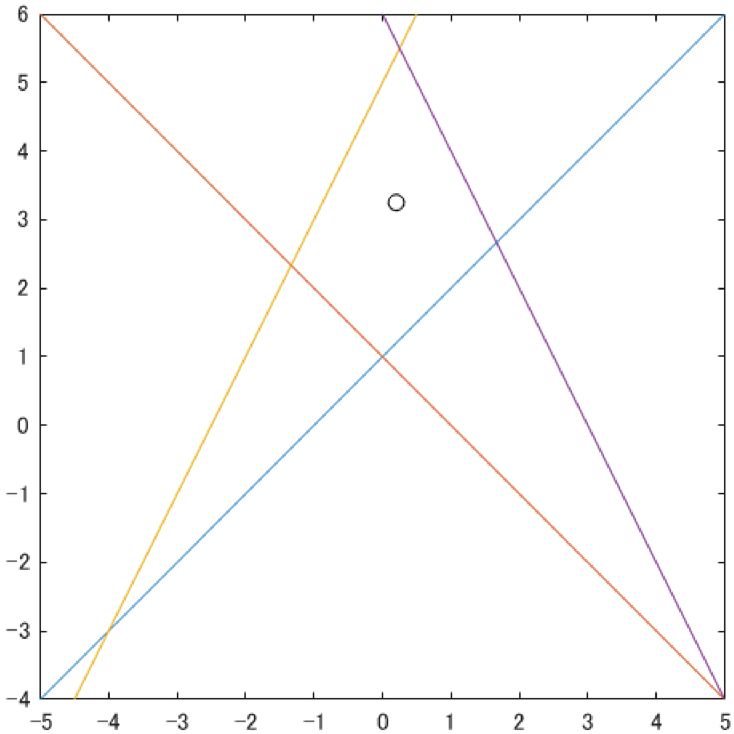
の解である．${}^tAA$ をグラム行列という．ここではグラム行列の意味を考えてみよう．

$$A\mathbf{x}=\begin{pmatrix}-1 & 1\\ 1 & 1\\ 2 & -1\\ 2 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\ 1\\ -5\\ 6\end{pmatrix}=\mathbf{b}\quad .$$

方程式の数と未知数の数が合わないので，解は存在しない．

3つの直線を図に描き，後で求まる最小二乗解を描き入れておく．

```
f=@(x,y) -x+y-1;
g=@(x,y)  x+y-1;
h=@(x,y) 2*x-y+5;
i=@(x,y) 2*x+y-6;
fimplicit(f,[-5 5 -4 6]);hold on
fimplicit(g,[-5 5 -4 6]);hold on
fimplicit(h,[-5 5 -4 6]);hold on
fimplicit(i,[-5 5 -4 6]);hold on
plot(0.2,3.25,'-.ok')
daspect([1 1 1])
hold off
```




解に対して3点と，得られた直線を図示せよ．

```
A=[-1 1; 1 1; 2 -1;2 1];
b=[1;1;-5;6];
x=(A'*A)\(A'*b)
```

```
x = 2×1
    0.2000
    3.2500
```

```
J=(A*x-b)'*(A*x-b)
```

```
J = 20.3500
```

● ［補足］ここで得られる値 x=(A'*A)\(A'*b) および J=(A*x-b)'*(A*x-b) は何かについて，講義の際に説明したことに少し補足をしよう．

以下のような計算をしてみる．J1は上で定義した評価関数である．

```
syms u v
J1=(-u+v-1)^2+(u+v-1)^2+(2*u-v+5)^2+(2*u+v-6)^2;
J2=10*(u-1/5)^2+4*(v-13/4)^2+407/20
```

J2 =

$$10\left(-\frac{1}{5}+u\right)^2+4\left(-\frac{13}{4}+v\right)^2+\frac{407}{20}$$

```
J11=expand(J1);
J22=expand(J2);
```

```
J11-J22
```

ans = $0$

直線 f 上の点を$(x_t, x_t)$，今求めたい点を$(x, y)$とし，直線の方程式を $a_1x + a_2y - b = 0$ とする（下図）.

点 $(x, y)$ より直線に下ろした垂線の足の長さは，下の図に示すように $\dfrac{a_1x_1 + a_2x_2 - b}{\|(a_1, a_2)\|}$ となる.

したがって上で定義した評価関数 $J = \|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2$ は,

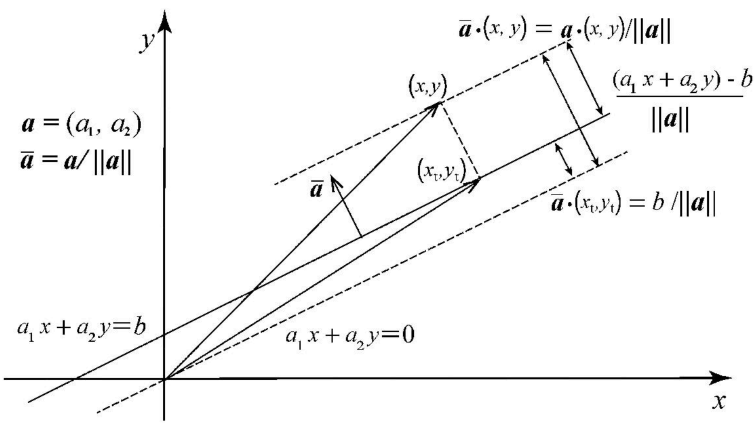
$\left[\text{点}(x.y)\text{から直線に下ろした垂線の足の長さ} \times \ \|(a_1, a_2)\|\right]^2$

の，直線についての和である.

すなわち，f, g, h, iの4つの直線で囲まれた領域付近の点で，（交点ではないし，また重心でもないが，）

上のような評価関数の下で，交点に近いという「意味合い」を持つ点といえる.

もし、直線 f の方程式を，ここで与えたものの定数倍すれば，（直線は変わらないのに）評価関数の重みが変わってくるので，結果が変わってくるということになる．このことにも注意しておかなくてはならない.




グラム行列の式

$$ {}^tA A\mathbf{x} = {}^tA\mathbf{b} $$

に変形すれば

```
A=[-1 1; 1 1; 2 -1;2 1];
b=[1;1;-5;6];
```

${}^tAA$ は

```
A'*A
```

```
ans = 2×2
    10     0
     0     4
```

$$ {}^tA A\mathbf{x} = {}^tA\mathbf{b} $$

となり，$ {}^tA A\mathbf{x} = {}^tA\mathbf{b} $ を満足する解 $\begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \end{pmatrix}$ が求まる：

```
x=(A'*A)\(A'*b)
```

```
x = 2×1
    0.2000
    3.2500
```

この点が上の図に丸印で記入してある.

またこのときの評価関数の値 J は

```
J=(A*x-b)'*(A*x-b)
```

```
J = 20.3500
```

である.

以上が最小二乗解，すなわち最初に設定したJを最小化する $(x_1, x_2)$ とJの値である.

$$\begin{pmatrix} 10 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 13 \end{pmatrix}$$

を図に描こう.

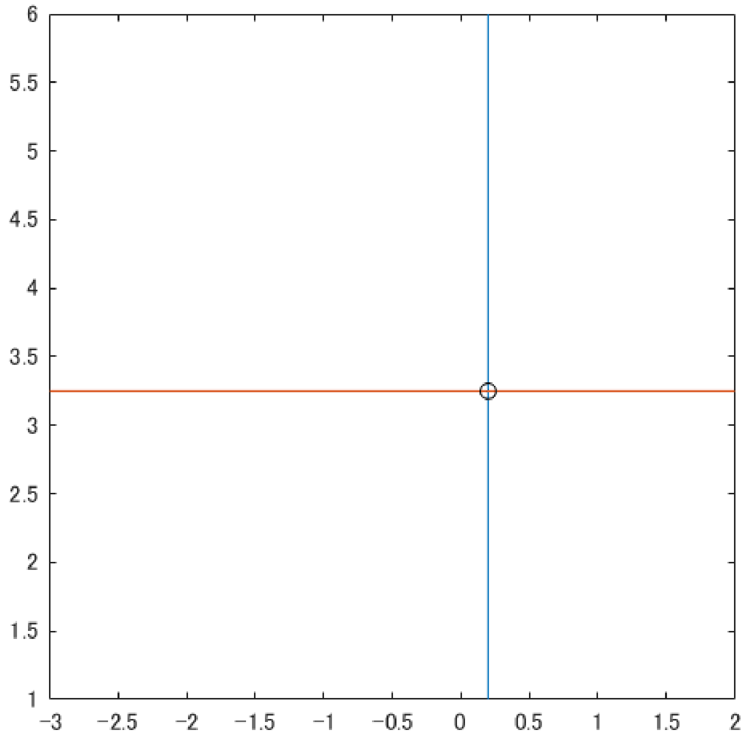
```
F1=@(x,y) 10*x+0*y-2
```

```
F1 = 値をもつ function_handle:
    @(x,y)10*x+0*y-2
```

```
F2=@(x,y)  0*x+4*y-13
```

```
F2 = 値をもつ function_handle:
    @(x,y)0*x+4*y-13
```

```
fimplicit(F1,[-3 2 1 6]);hold on
fimplicit(F2,[-3 2 1 6]);hold on
plot(0.2,3.25,'-.ok')
daspect([1 1 1])
hold off
```




課題

行列$A$，ベクトル$\mathbf{b}$ について，最小二乗解を求めよ．

（図を描くスクリプトのみは与えておく．）

$$A=\begin{pmatrix}-2&1\\1&1\\2&-1\\3&1\end{pmatrix},\quad \mathbf{b}=\begin{pmatrix}1\\1\\-5\\3\end{pmatrix}$$

(1)

```
f=@(x,y) -2*x+y-1;
g=@(x,y)  x+y-1;
h=@(x,y) 2*x-y+5;
i=@(x,y) 3*x+y-3;
fimplicit(f,[-5 5 -4 6]);hold on
fimplicit(g,[-5 5 -4 6]);hold on
fimplicit(h,[-5 5 -4 6]);hold on
fimplicit(i,[-5 5 -4 6]);hold on
daspect([1 1 1])
hold on
x=[-2;1;2;3]
```

```
x = 4×1
    -2
     1
```

```
     2
     3
```

```
u=[1;1;1;1]
```

```
u = 4×1
     1
     1
     1
     1
```

```
y=[1;1;-1;1]
```

```
y = 4×1
     1
     1
    -1
     1
```

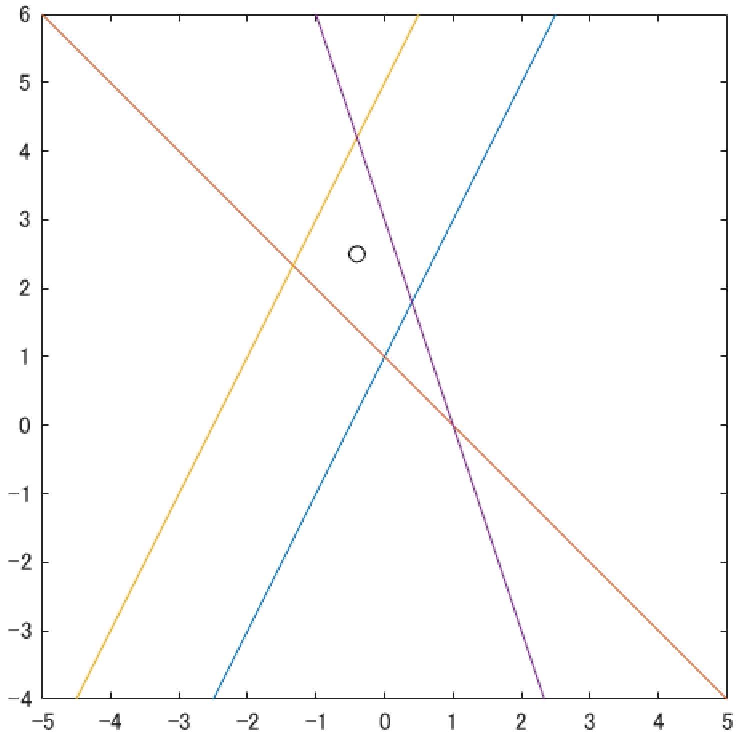
```
b=[1;1;-5;3]
```

```
b = 4×1
     1
     1
    -5
     3
```

```
xp=(A'*A)\(A'*b)
```

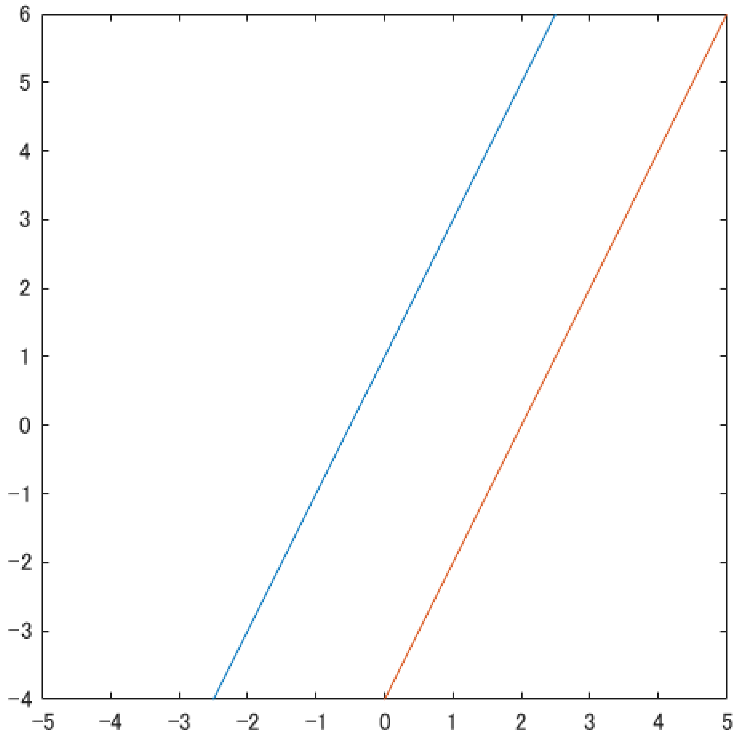
```
xp = 2×1
   -0.4000
    2.5000
```

```
plot(-0.4,2.5,'-.ok')
hold off
```




(2) $A = \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 1 & -0.5 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$

```
f=@(x,y) -2*x+y-1;
g=@(x,y)  x-0.5*y-2;
fimplicit(f,[-5 5 -4 6]);hold on
fimplicit(g,[-5 5 -4 6]);hold on
daspect([1 1 1])
hold off
```




以下で，いくつかのさらなる例を見よう．

## 例1

$$A\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix} = \mathbf{b} \quad .$$

この方程式は解を持たない（rank(A)=1)．

しかし上と同様な式

$$ {}^tAA\mathbf{x} = {}^tA\mathbf{b}$$

と変形すれば

$$ {}^tAA\mathbf{x}' = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1' \\ x_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 4 \end{pmatrix} = {}^tA\mathbf{b}$$

となり，これを解いて

$$x_1' + x_2' = 2$$

を得る．これが最小二乗解である．

課題

自分で同じような例題を考えてみよ．

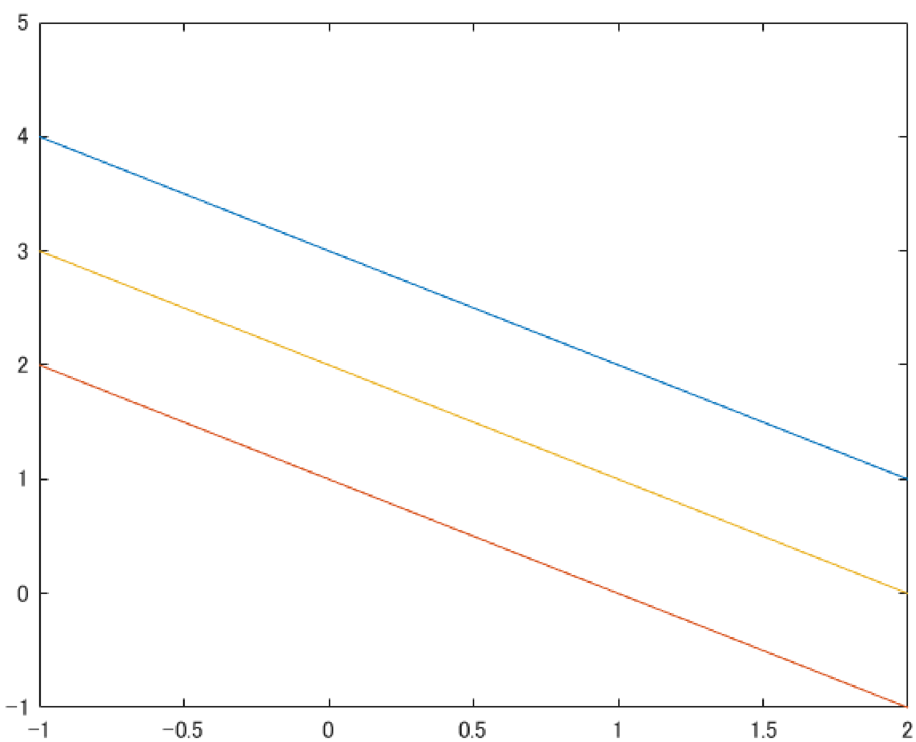
## 最小二乗解の意味するもの （例1）

例1の最小二乗解が意味するところを図に示す．以下の2点を考えてほしい．

（１）2つの式$x_1+x_2=3,\quad x_1+x_2=1$が示す直線

（２）最小二乗解の直線

```
f=@(x,y) x+y-3;
g=@(x,y) x+y-1;
h=@(x,y) x+y-2;
fimplicit(f,[-1 2 -1 5]);
hold on
fimplicit(g,[-1 2 -1 5]);
hold on
fimplicit(h,[-1 2 -1 5]);
hold off
```




解は直線上の任意の点で，一意的には決まっていない．

## 例2

$$A\mathbf{x}=\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}3\\ 3\end{pmatrix}=\mathbf{b}\quad .$$

この方程式は解が定まらない（rank(A)=1）．

しかし上と同様な式

$$ {}^tA A\mathbf{x} = {}^tA\mathbf{b} $$

と変形すれば

$$ {}^tA A\mathbf{x}' = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 6 \end{pmatrix} = {}^tA\mathbf{b} $$

となり，これを解いて

$$ x'_1 + x'_2 = 3 $$

を得る．これが最小二乗解である．

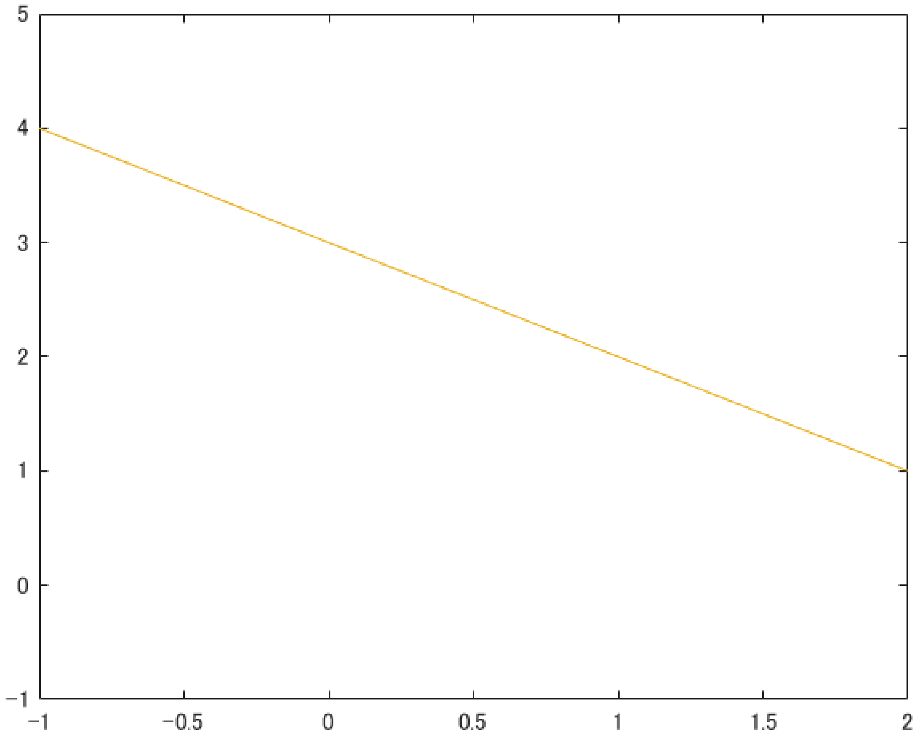
最小二乗解の意味するもの：例**2**

例2の最小二乗解が意味するところを図に示す．以下の2点を考えてほしい．

（１）2つの式$x_1 + x_2 = 3,\quad x_1 + x_2 = 3$が示す直線

（２）最小二乗解の直線

```
f=@(x,y) x+y-3;
g=@(x,y) x+y-3;
h=@(x,y) x+y-3;
fimplicit(f,[-1 2 -1 5]);
hold on
fimplicit(g,[-1 2 -1 5]);
hold on
fimplicit(h,[-1 2 -1 5]);
hold off
```




ここでも解は直線状の任意の点で，一意的には決まっていない．

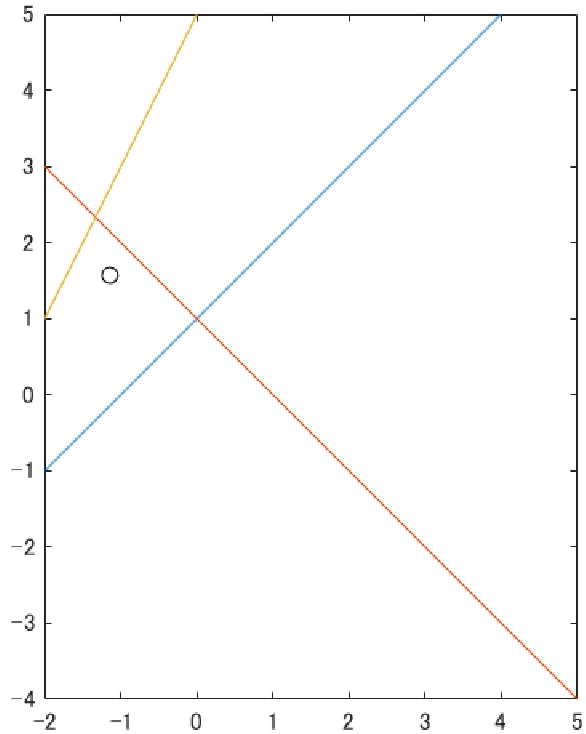
## 例３

$$Ax = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 2 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -5 \end{pmatrix} = \mathbf{b} \quad .$$

方程式の数と未知数の数が合わないので，解は存在しない．

3つの直線を図に描き，後で求まる最小二乗解を描き入れておく．

```
f=@(x,y) -x+y-1;
g=@(x,y)  x+y-1;
h=@(x,y) 2*x-y+5;
fimplicit(f,[-2 5 -4 5]);hold on
fimplicit(g,[-2 5 -4 5]);hold on
fimplicit(h,[-2 5 -4 5]);hold on
plot(-1.1429,1.5714,'-.ok'); hold on
daspect([1 1 1])
hold off
```




グラム行列の式

$$ {}^tAA\mathbf{x} = {}^tA\mathbf{b} $$

に変形すれば

```
A=[-1 1; 1 1; 2 -1];
b=[1;1;-5];
A'*A
```

```
ans = 2×2
     6    -2
    -2     3
```

```
A'*b
```

```
ans = 2×1
   -10
     7
```

```
x=(A'*A)\(A'*b)
```

```
x = 2×1
   -1.1429
    1.5714
```

```
J=(A*x-b)'*(A*x-b)
```

```
J = 4.5714
```



$$ {}^{t}AA\mathbf{x}' = \begin{pmatrix} 6 & -2 \\ -2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -10 \\ 7 \end{pmatrix} = {}^{t}A\mathbf{b} $$

となり，これを満足する解が求まる：

$$ \begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1.1429 \\ 1.5714 \end{pmatrix} . $$

この点が上の図に丸印で記入してある.

これが最小二乗解，すなわち最初に設定したJを最小化する $(x_1, x_2)$ である.

$$ \begin{pmatrix} 6 & -2 \\ -2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -10 \\ 7 \end{pmatrix} $$

を図に描こう.

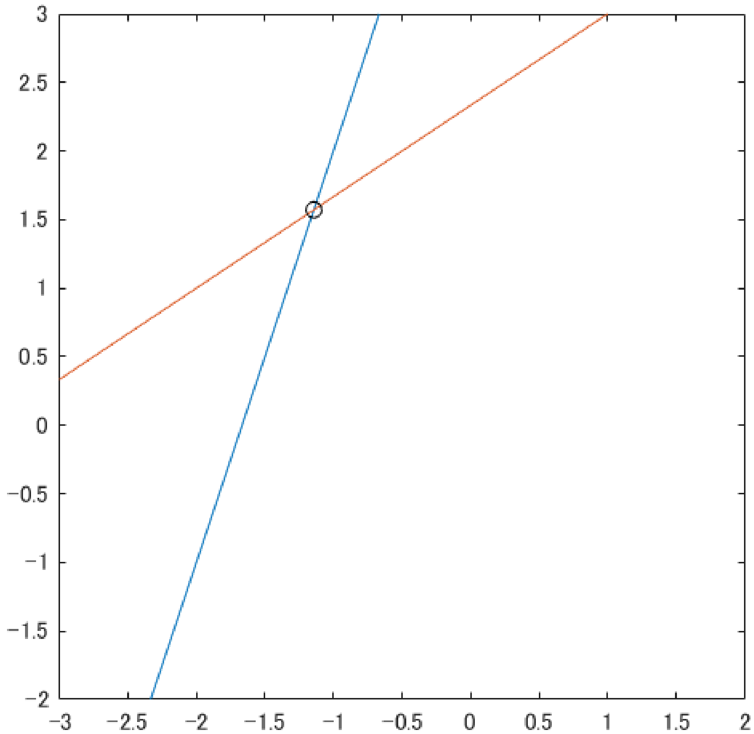
```
F1=@(x,y) 6*x-2*y+10
```

```
F1 = 値をもつ function_handle:
    @(x,y)6*x-2*y+10
```

```
F2=@(x,y) -2*x+3*y-7
```

```
F2 = 値をもつ function_handle:
    @(x,y)-2*x+3*y-7
```

```
fimplicit(F1,[-3 2 -2 3]);hold on
fimplicit(F2,[-3 2 -2 3]);hold on
plot(-1.1429,1.5714,'-.ok')
daspect([1 1 1])
hold off
```



課題

$$A\mathbf{x} = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 4 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -10 \end{pmatrix} = \mathbf{b}$$

の場合を考えよ．

例3と同様な場合である．3つの直線および最小二乗解について例3と同様な議論を行え．