科学実験/画像変換の近似計算に便利な「疑似逆行列」入門

得計算テク

できる人が使っている最小二乗法の一発フィット

安川 章

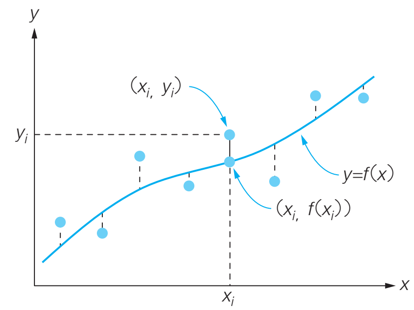

図1　複数のデータから最もそれらしい近似式を求める定番「最小二乗法」で便利な「疑似逆行列」による計算法を紹介する

ここでは，知る人ぞ知る，ビギナはあまり知らないかもしれない便利な最小二乗法の計算方法を紹介します．疑似逆行列という行列を使うことで，通常の計算方法だと必要な偏微分などを使わずに簡単に計算できます．表計算ソフトExcelがあれば試すことができます．近似関数は画像の移動・回転・拡大・縮小などの計算に使うこともできます．

近似式を求める定番：最小二乗法入門

● 原理

複数のデータから近似式を求めるには，一般に最小二乗法という手法が用いられます．

基本的な考え方は，近似式と各データとの誤差を2乗したものが最小となる式を求める方法です．

例えば，2次元座標のとき，n個のデータ$(x_i,\ y_i)$を，関数$y=f(x)$で近似する場合，各データ$(x_i,\ y_i)$と近似式上の点$y=f(x)$との差は，

$$y_i-f(x_i) \quad\cdots\cdots\ (1)$$

です．この差を2乗し，合計した値，

$$\sum_{i=1}^{n}(y_i-f(x_i))^2 \quad\cdots\cdots\ (2)$$

が最小となる$f(x)$を求めることができれば，$f(x)$が各データの近似式となります(**図1**)．

● 一般的な計算方法(2次関数近似)

以下，2次関数で近似する場合を例にとって説明していきたいと思います．

$$y=f(x)=ax^2+bx+c \quad\cdots\cdots\ (3)$$

差の2乗の合計は，

$$\sum_{i=1}^{n}(y_i-(ax^2+bx+c))^2 \quad\cdots\cdots\ (4)$$

となります．この値を最小にするには，a，b，cに関して偏微分を行い，偏微分の値が0となるa，b，cを求めます．

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial a} &= a\sum_{i=1}^{n}x_i^4+b\sum_{i=1}^{n}x_i^3+c\sum_{i=1}^{n}x_i^2-\sum_{i=1}^{n}x_i^2y_i=0\\
\frac{\partial}{\partial b} &= a\sum_{i=1}^{n}x_i^3+b\sum_{i=1}^{n}x_i^2+c\sum_{i=1}^{n}x_i-\sum_{i=1}^{n}x_i\,y_i=0 \quad\cdots\ (5)\\
\frac{\partial}{\partial c} &= a\sum_{i=1}^{n}x_i^2+b\sum_{i=1}^{n}x_i+c\sum_{i=1}^{n}1-\sum_{i=1}^{n}y_i=0
\end{aligned}$$

ここで，Σの部分は定数となります．未知数はa，b，cの3つで式が3本あることから，3元連立1次方程式として未知数を解くことができます．

行列で表すと，

$$\begin{pmatrix}
\sum_{i=1}^{n}x_i^4 & \sum_{i=1}^{n}x_i^3 & \sum_{i=1}^{n}x_i^2\\
\sum_{i=1}^{n}x_i^3 & \sum_{i=1}^{n}x_i^2 & \sum_{i=1}^{n}x_i\\
\sum_{i=1}^{n}x_i^2 & \sum_{i=1}^{n}x_i & \sum_{i=1}^{n}1
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}a\\b\\c\end{pmatrix}=
\begin{pmatrix}
\sum_{i=1}^{n}x_i^2y_i\\
\sum_{i=1}^{n}x_i\,y_i\\
\sum_{i=1}^{n}y_i
\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}a\\b\\c\end{pmatrix}=
\begin{pmatrix}
\sum_{i=1}^{n}x_i^4 & \sum_{i=1}^{n}x_i^3 & \sum_{i=1}^{n}x_i^2\\
\sum_{i=1}^{n}x_i^3 & \sum_{i=1}^{n}x_i^2 & \sum_{i=1}^{n}x_i\\
\sum_{i=1}^{n}x_i^2 & \sum_{i=1}^{n}x_i & \sum_{i=1}^{n}1
\end{pmatrix}^{-1}
\begin{pmatrix}
\sum_{i=1}^{n}x_i^2y_i\\
\sum_{i=1}^{n}x_i\,y_i\\
\sum_{i=1}^{n}y_i
\end{pmatrix} \quad\cdots\cdots\ (6)$$

となります．これを計算すると，未知数a，b，cが求まり，近似式の$f(x)$も求まります．