

多項式による最小二乗近似と コレスキー分解の関係について

京都産業大学 戸川 隼人

直交多項式系の係数が、ある行列の「コレスキー」分解によって得られることを示し、最小二乗近似と三角分解の関係を明らかにする。実際の数値計算の手段としては演算回数が多いのであまり得策ではないが、理論的興味からとりあげてみた。

問題 与えられた関数 $f(x)$ を、 n 次多項式 $P(x)$ により、区間 $[a, b]$ において 重み関数 $W(x)$ に対し、最小二乗近似する。と、

$$\int_a^b W(x) \{P(x) - f(x)\}^2 dx \rightarrow \text{最小} \quad (1)$$

ただし $W(x)$ は $[a, b]$ において常に正で、可積分、また $f(x)$ は何回でも微分可能とする。以下の議論は、多変数の場合、あるいは複素関数の場合にも、だいたい同じ筋書きで拡張できるが、ここでは簡単のため、1変数の実関数としておく。

処理法 まず、

$$C_{ij} = \int_a^b W(x) \cdot x^{i+j} dx \quad (2)$$

主要素とする行列 C を作る。ここで添字は 0 から始まるものとする。

$$C = \begin{pmatrix} C_{00} & C_{01} & C_{02} & \cdots \\ C_{10} & C_{11} & C_{12} & \cdots \\ C_{20} & C_{21} & C_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (3)$$

理論上は C を無限行列として扱っておくのが自然でよい。しかし計算する場合には $m \times m$ 行列 (ただし $m > n$) と考えて扱ってよい。

式 (2) の定義から明らかに、 C は対称、正定値である。したがって、次の形のコレスキー分解が可能である。

$$C = L \cdot L^T \quad (4)$$

ただし L は左下三角行列、 L^T はその転置行列。

多項式 $P(x)$ の係数から、列ベクトル P を作る。

$$P(x) = p_0 + p_1 x + p_2 x^2 + p_3 x^3 + \cdots$$

$$P = \begin{pmatrix} p_0 \\ p_1 \\ p_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (5)$$

ただし $p_{n+1} = p_{n+2} = \cdots = 0$ としておく。

また $f(x)$ のべき級数展開の係数から列ベクトル $\mathbf{f}$ を作る。

$$f(x) = f_0 + f_1 x + f_2 x^2 + f_3 x^3 + \dots$$

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (6)$$

こゝろを用いると、式(1)は次のように書き換えることができる。

$$(\mathbf{P} - \mathbf{f})^T \mathbf{C} (\mathbf{P} - \mathbf{f}) \rightarrow \text{最小}$$

式(4)を用いて 2乗和の形になおすと、

$$(\mathbf{P} - \mathbf{f})^T \mathbf{L} \mathbf{L}^T (\mathbf{P} - \mathbf{f}) \rightarrow \text{最小}$$

$$\{ \mathbf{L}^T (\mathbf{P} - \mathbf{f}) \}^T \cdot \{ \mathbf{L}^T (\mathbf{P} - \mathbf{f}) \} \rightarrow \text{最小}$$

$$\| \mathbf{L}^T (\mathbf{P} - \mathbf{f}) \|^2 \rightarrow \text{最小}$$

$$\| \mathbf{L}^T \mathbf{P} - \mathbf{L}^T \mathbf{f} \|^2 \rightarrow \text{最小} \quad (7)$$

そこで

$$\mathbf{u} = \mathbf{L}^T (\mathbf{P} - \mathbf{f}) \quad \mathbf{v} = \mathbf{L}^T \mathbf{P} \quad \mathbf{w} = \mathbf{L}^T \mathbf{f}$$

と置けば

$$\mathbf{u} = \mathbf{v} - \mathbf{w} \quad \text{以上、(8)}$$

よ、式(7)は

$$\| \mathbf{u} \|^2 = \| \mathbf{v} - \mathbf{w} \|^2 = \sum_i (v_i - w_i)^2 \rightarrow \text{最小} \quad (9)$$

となる。ただし

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ u_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_0 \\ v_1 \\ v_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \mathbf{w} = \begin{pmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

式(9)の最小化のためには、各項別に $(v_i - w_i)^2$ を最小にすればよい。そのためには、 $v_i = w_i$ にとることが（もしも可能ならば）最も良いわけであるが、 v は

$$v = L^T P = \begin{array}{|c|} \hline \begin{array}{c} \text{右上} \\ \text{三角} \\ \text{行列} \\ 0 \end{array} \\ \hline \end{array} \cdot \begin{array}{|c|} \hline \text{上から} \\ n+1 \text{個} \\ \text{だけが non-zero} \\ 0 \\ \hline \end{array} \quad (10)$$

であるから

$$v_{n+1} = v_{n+2} = \dots = 0$$

であり、したがって $i \geq n+1$ に関しては $v_i = w_i$ にとることができず、 $(v_i - w_i)^2 = w_i^2$ が残差として残る。

一方、 $i \leq n$ の成分に関しては、ベクトル P は $n+1$ 個の自由度があり、条件式

$$v_i = w_i \quad (w_i : \text{given})$$

が $n+1$ 個あるので、うまく解くことができて、それによって P を決定することができると。すなわち、 P および β , v , w などの、上側 $n+1$ 個の成分（添字 $0 \sim n$ ）だけで作られるベクトルを、

$$P_n = \begin{pmatrix} p_0 \\ p_1 \\ \vdots \\ p_n \end{pmatrix} \quad \beta_n = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_n \end{pmatrix} \quad \dots \text{etc}$$

というように書き、同様に行列も左上 $(n+1) \times (n+1)$ の部分を

添字 n を付けて表わすことにすれば、方程式は

$$\begin{aligned} W_n &= W_n \\ \therefore L_n^T P_n &= W_n \\ \therefore P_n &= (L_n^T)^{-1} W_n \end{aligned} \quad (11)$$

ここで W_n は

$$\begin{aligned} L_n^T &= (L_n^T L_n) L_n^T = L_n^T (L_n L_n^T) = L_n^T C_n \\ \therefore W_n &= L_n^T f_n = L_n^T C_n f_n \end{aligned} \quad (12)$$

により求めることができる。

ここで積 $C_n f_n$ を、定義式(2), (6) にもどって考えてみると、

$$C_n f_n = b_n = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (13)$$

と置くとき

$$b_n = \int_a^b W(x) x^n f(x) dx \quad (14)$$

となることがわかる。ここで b_n を作り、 L_n^T を掛けると W_n が得られ、さらに $(L_n^T)^{-1} = (L_n^T)^T$ を掛けると P_n が得られる。この中間結果の意味を考えると次のように解釈できる。

- ① L^T の各行は、区間 $[a, b]$ の上の、重み関数 $W(x)$ に関する、直交多項式の係数を与える。実際、

$$L^T C (L^T)^T = L^T (L L^T) (L^T)^T = I \quad (15)$$

- ② $w_0, w_1, w_2, \dots$ は、この直交多項式に関する、 $f(x)$ のフーリエ係数である。

検討 直交性は、前頁の (15) 式、すなわち、もとをたどれば (4) 式から出ている。したがって一般に、 C を

$$C = MM^T$$

の形に分解できれば、 M^T の各行は、直交関数の係数を与えてくれる。この M として、特に左下三角行列 L をとった場合には、直交関数であるだけでなく、0次、1次、2次、... の多項式の形になるわけだ。そこはコレスキー分解の特性が現れている。