過剰条件の連立一次方程式に対する最小二乗法

2000MM043 近藤 寿紀

指導教員　鳥居 達生

1　はじめに

過剰条件の連立一次方程式の解は一般に存在しないので, 最小二乗法の意味で解を求めることが多くの分野で必要とされる. 現在では, あるデータを入力したらすぐに演算を実行して演算結果を返してくれる計算機の便利なソフトが実用化されてる. 今回, 具体的にどのように解を導きだすかといった内容を追求する. 本研究においては, 既成の計算ソフトに頼る事なく, 過剰条件の連立一次方程式を解くための手法として最小二乗法に着目した. 最小二乗法により最小二乗解を求めるには行列の QR 分解が必要となる. この QR 分解には極めて初歩的な面回転の原理に基ずく $Givens$ 回転法を利用した [1], [2]. このような理論を学習した上で過剰条件の連立一次方程式を解くプログラムを自分自身で作成することによりプログラミング技術を修得し, 最小二乗法を応用できるようにする事を目的とする.

2　最小二乗法

2.1　過剰条件の連立一次方程式の最小二乗解

例えばある製品 A と B を生産している工場があるとする. 製品 A と B を作るには両製品とも三種類の原材料 a, b, c を必ず必要とする. そこで製品 A を一個生産するには原材料 a を $3kg$, b を $1kg$, c を $2kg$ 必要とし, 製品 B を一個生産するには原材料 a を $4kg$, b を $7kg$, c を $8kg$ 必要とする. ある製造日に, 原材料 a を $1000kg$, b を $1200kg$, c を $1500kg$ 仕入れ, この仕入れた原材料全てを使用して製品 A と B をつくるとき, この製造日の生産量を求めよ.

というような問題に対して, まず製品 A の生産量を x_1 個, 製品 B の生産量を x_2 個として原材料 a, b, c の方程式をそれぞれ作ると,

$$\begin{cases} 3x_1 + 4x_2 = 1000 \\ 1x_1 + 7x_2 = 1200 \\ 2x_1 + 8x_2 = 1500 \end{cases}$$

と記述される. この連立一次方程式は未知数より方程式の数の方が多い. このような未知数 x_1,x_2,$\cdots$,x_n の数 n が方程式の数 m より小さい連立一次方程式のことを過剰条件の連立一次方程式と言う.

このような過剰条件の連立一次方程式の解は一般に存在しない. しかしながら, 現実にこの工場の経営者はこういった問題を解かざるを得ないのであり, 困った経営者が思いつくことは最も良い近似解を求めることである. そこで左辺 $y = Ax$ と右辺 b との距離の二乗

$$F(x) \equiv ||b - y||_2^2 = ||b - Ax||_2^2$$

が 0 にならないまでも最小となる $x = x^*$ を解として採用することが考えられる. この方法を最小二乗法と言い, 解 x^* を最小二乗解と言う. 方程式において 0 にするべき量 : $r = b - Ax$ を残差と言う. 最小二乗法は残差の 2-ノルムを最小にする方法である [3].

2.2　最小二乗解と正規方程式

最小二乗解は正規方程式 $A^TAx = A^Tb$ を解くことにより得られる. この正規方程式は簡潔な表現であるが, 正規方程式を解くことは計算回数が多く, 丸め誤差の影響を受けやすいため, 数値計算上不安定となる. よって最小二乗解は係数行列 A の QR 分解を用いることにより安定的に求めることが可能である. QR 分解とは任意の行列を何らかの手法, 手段によって直交行列×上三角行列の形に変換することである.

2.3　$Givens$ 変換による QR 分解

本研究で用いた $Givens$ 回転法は最も簡単な直交変換であるだけでなく, 丸め誤差の影響を受けにくい利点があるため, 精度の良い QR 分解を行うことが可能である. $Givens$ 法とは, いわゆる面内回転と呼ばれる変換を繰り返すことによって, 対角成分のすぐ下の非零成分を一つずつ 0 にしていく方法なのである. この変換を任意の行列に適応することにより, 任意の行列は QR 分解されるのである. この時, 使用される変換の行列は二次元の場合, $P_{k,k-1} = \begin{pmatrix} \cos\vartheta & \sin\vartheta \\ -\sin\vartheta & \cos\vartheta \end{pmatrix}$ の形に表される. この変換は, 第 $k-1$ 番目と第 k 番目の座標軸を双方の成す平面内において, 反時計周りに角度 ϑ だけ回転させることに対応しているので, この行列を乗ずる演算のことを面内回転と呼ぶ. $P_{k,k-1}$ は, $P_{k,k-1}^TP_{k,k-1} = I$ を満たすことより, $P_{k,k-1}$ は直交行列である. このような行列の積も直交行列となり, 以下に示すように QR 分解が得られるのである. いま, 任意の $n \times n$ 行列 A が,
$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & & a_{n,n-1} & a_{n,n} \end{pmatrix}$ の形で与えられるとする.

これに $k-2$ 回の面回転を行って対角成分のすぐ下の成分を順次 0 にしていった結果,

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & & & \vdots \\ & \ddots & \ddots & & \vdots \\ & 0 & a_{k-1,k-1} & a_{k,k} & \vdots \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & & & a_{n,n-1} & a_{n,n} \end{pmatrix}$$

となったとする. すなわち A の左上 $k-1 \times k-1$ 小行列の部分は既に上三角行列になっているとする. 次に A の第 $k, k-1$ 成分である $a_{k,k-1}$ を消去する面内回転を A に施す. このとき, A の第 $k-1$ 行と第 k 行以外は変化を受けない. このとき変化するのは,

$$\begin{cases} a_{k-1,j} = a_{k-1,j}\cos\vartheta + a_{k,j}\sin\vartheta, \\ a_{k,j} = -a_{k-1,j}\sin\vartheta + a_{k,j}\cos\vartheta, \ j = k-1, k, \cdots, n \end{cases}$$

の部分だけである. ここで, ϑ を

$$a_{k,k-1} = -a_{k-1,k-1}\sin\vartheta + a_{k,k-1}\cos\vartheta = 0$$

つまり, $\tan\vartheta = \frac{a_{k,k-1}}{a_{k-1,k-1}}$ を満たすように選べば A の $k \times k$ の左上小行列の部分は上三角となるのであるが, 実際の計算では

$$\cos\vartheta = \frac{a_{k-1,k-1}}{\sqrt{a_{k,k-1}^2 + a_{k-1,k-1}^2}}, \ \sin\vartheta = \frac{a_{k,k-1}}{\sqrt{a_{k,k-1}^2 + a_{k-1,k-1}^2}}$$

として計算する. この面回転を $n-1$ 回行うと, 最終的に上三角行列

$$R = P_{n,n-1}P_{n-1,n-2}\cdots P_{21}A$$

が導かれることにより, $A = QR$ が得られる. ただし,

$$\begin{aligned} Q &= (P_{n,n-1}P_{n-1,n-2}\cdots P_{21})^{-1} \\ &= P_{21}^T P_{32}^T \cdots P_{n,n-1}^T \end{aligned}$$

である. $P_{k,k-1}^T$ は直交行列であるのでその積である Q も直交行列である. よって $Givens$ 変換により行列 A が QR 分解されることが示された.

QR 分解後, 逆代入により過剰条件の連立一次方程式の最小二乗解を求めることが可能となる.

3 プログラム及び実行結果

3.1 要点

以上の理論を基に過剰条件の連立一次方程式を最小二乗法により最小二乗解を求めるプログラムを作成した. QR 分解を関数プログラムとして独立させ, 係数行列, 右辺ベクトルを読み込ませる関数や QR 分解後の上三角行列を逆代入によって最小二乗解を求めるための関数を作成した. ランク落ちが確認できた場合にはその時点でプログラムを終了させるような処理を加え更に, 出力の方法として少しでも見やすくなるように, 行列表示する場合は列数を最大 4 列に制限した. また, 最小二乗法によって得られた最小二乗解が正しいかどうか確認するため, 正規方程式 $A^TAx = A^Tb$ を変形させた $A^T(x - Ab) = 0$ となるような検算もプログラムに組み込んだ. これは残差に係数行列の転置 A^T をかけたものが 0 になっていれば得られた最小二乗解は正しいと同時に作成したプログラムも正しい事がわかる. 更には, 係数行列 A の QR 分解によって更新された右辺ベクトルと正規直交行列 Q によって直交変換された右辺ベクトルとの差を求める. つまり正規直交行列 Q の検算もプログラムに組み込んだ.

3.2 実行結果

最初に示した例題を C 言語による自作プログラムによって解いた結果を以下に示す.

ギブンス回転された係数行列と右辺ベクトル.

a_{11}	3.741657	a_{12}	9.354143	b_1	1964.369995
a_{21}	0.000000	a_{22}	6.442049	b_2	966.307312
a_{31}	0.000000	a_{32}	0.000000	b_3	-0.000114

ギブンス回転された正規直交行列 Q.

	第 1 列	第 2 列	第 3 列
第 1 行:	0.801784	0.267261	0.534522
第 2 行:	-0.543305	0.698535	0.465690
第 3 行:	-0.248922	-0.663792	0.705279

残差と解.

	残差の第 1 列	解の第 1 列
第 1 行:	-3.098145	128.743546
第 2 行:	-8.261719	154.216873
第 3 行:	8.777954	

この結果より $Givens$ 回転により確かに係数行列が QR 分解され, 過剰条件の連立一次方程式を最小二乗法によって最小二乗解が求められていることが確認できる. また, 残差が負となっていることから原材料 a, b が不足していることが確認できる. 結論として製品の生産量はそれぞれ $A = 128$, $B = 154$ 個となるのであるがこれでは原材料不足のため, この製造日は製品の生産量を $A = 128$, $B = 153$ 個に抑える必要がある. ただし, 原材料の予備などがあれば先の解がこの製造日の生産量となる.

4 おわりに

本研究をまとめるとやはり数学の理論とプログラミングのギャップは小さいものではないという印象を受けた. また, この研究の目的であった最小二乗法の理論並びにプログラミング技術の修得により最小二乗法を応用できるようにすることは, ほぼ達成出来たと感じている. 疑似乱数を利用して大規模な最小二乗解を求めるプログラムも作成した. しかし, 今後の課題として数値実験, 解の検算, 他の方法との比較などが挙げられる. 今後は疑似乱数を利用した実験だけに限らず, 実際の統計データを扱って本研究で作成したプログラムを適用してみたいと考えている.

参考文献

[1] 森正武 著: 数値解析, 共立出版株式会社, 1973 年

[2] 森正武, 杉原正顕, 室田一雄 著: 線形計算, 岩波書店, 1994 年

[3] 杉浦洋 著: 数値計算の基礎と応用-数値解析学への入門-, サイエンス社, 1997 年