数理解析研究所講究録
第149巻 1972年 168-173

多項式による最小2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2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 $W(x)$ に関し、最小2乗近似すること。

$$\int_a^b W(x)\{P(x)-f(x)\}^2 dx \to 最小 \qquad (1)$$

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。

$\boxed{\text{処理法}}$ まず、

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

を要素とする行列 $\mathbb{C}$ を作る。ここで添字は 0 から始まるものとする。

$$\mathbb{C} = \begin{pmatrix} C_{00} & C_{01} & C_{02} & \cdots \\ C_{10} & C_{11} & C_{12} & \cdots \\ C_{20} & C_{21} & C_{22} & \cdots \\ & \cdots\cdots & & \end{pmatrix} \tag{3}$$

理論上は $\mathbb{C}$ 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、$\mathbb{C}$ 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。

$$\mathbb{C} = \mathbb{L} \cdot \mathbb{L}^T \tag{4}$$

ただし $\mathbb{L}$ は左下3角行列、$\mathbb{L}^T$ はその転置行列。

多項式 $P(x)$ の係数から、列ベクトル $\mathbb{P}$ を作る。

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

$$\mathbb{P} = \begin{pmatrix} p_0 \\ p_1 \\ p_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{5}$$

ただし $p_{n+1} = p_{n+2} = \cdots\cdots = 0$ 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 $\mathbb{f}$ を作る。

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

$$\mathbb{f} = \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ f_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad (6)$$

これらを用いると、式(1)は次のように書き換できる。

$$(\mathbb{F} - \mathbb{f})^T C (\mathbb{F} - \mathbb{f}) \to \text{最小}$$

式(4)を用いて2乗和の形になおすと、

$$(\mathbb{F} - \mathbb{f})^T L L^T (\mathbb{F} - \mathbb{f}) \to \text{最小}$$

$$\{L^T(\mathbb{F} - \mathbb{f})\}^T \cdot \{L^T(\mathbb{F} - \mathbb{f})\} \to \text{最小}$$

$$\| L^T(\mathbb{F} - \mathbb{f}) \|^2 \to \text{最小}$$

$$\| L^T \mathbb{F} - L^T \mathbb{f} \|^2 \to \text{最小} \qquad (7)$$

ここで

$$\mathbb{u} = L^T(\mathbb{F} - \mathbb{f}) \qquad \mathbb{v} = L^T \mathbb{F} \qquad \mathbb{w} = L^T \mathbb{f}$$

と置けば

$$\mathbb{u} = \mathbb{v} + \mathbb{w} \qquad \text{以上、}(8)$$

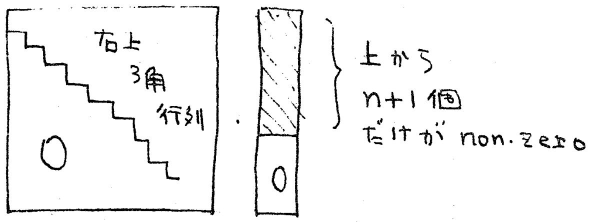
で、式(7)は

$$\| \mathbb{u} \|^2 = \| \mathbb{v} - \mathbb{w} \|^2 = \sum_i (v_i - w_i)^2 \to \text{最小} \qquad (9)$$

となる。ただし

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

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、$\mathbb{v}$ は

$\mathbb{v} = L^T \mathbb{P} =$ 

(10)

であるから

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

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

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

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

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 $\mathbb{P}$ を決定することができる。すなわち、$\mathbb{P}$ および $\mathbb{f}$, $\mathbb{v}$, $\mathbb{w}$ 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、

$$\mathbb{P}_n = \begin{pmatrix} p_0 \\ p_1 \\ \vdots \\ p_n \end{pmatrix} \qquad \mathbb{f}_n = \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix} \qquad \cdots \text{etc}$$

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

$$\mathbb{W}_n = \mathbb{w}_n$$

$$\therefore \quad L_n^T \mathbb{P}_n = \mathbb{w}_n$$

$$\therefore \quad \mathbb{P}_n = (L_n^T)^{-1} \mathbb{w}_n \qquad (11)$$

ここで $\mathbb{w}_n$ は

$$L_n^T = (L_n^{-1} L_n) L_n^T = L_n^{-1} (L_n L_n^T) = L_n^{-1} C_n$$

$$\therefore \quad \mathbb{w}_n = L_n^T \mathbb{f}_n = L_n^{-1} C_n \mathbb{f}_n \qquad (12)$$

によって求めることができる。

ここで積 $C_n \mathbb{f}_n$ を、定義式(2),(6)にもどって考えてみると、

$$C_n \mathbb{f}_n = \mathbb{b}_n = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad (13)$$

と置くとき

$$b_i = \int_a^b W(x)\, x^i f(x)\, dx \qquad (14)$$

となることがわかる。これで $\mathbb{b}_n$ を作り、L_n^{-1} を掛けると $\mathbb{w}_n$ が得られ、それに $(L_n^T)^{-1} = (L_n^{-1})^T$ を掛けると $\mathbb{P}_n$ が得られる。

この中間結果の意味を考えてみると 次のように解釈できる。

① L^{-1} 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、

$$L^{-1} C (L^T)^{-1} = L^{-1} (L L^T)(L^T)^{-1} = I \qquad (15)$$

② $w_0, w_1, w_2, \cdots$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、もとをただせば(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^{-1}の各行は、直交関数の係数を与える。このMとして、特に左下3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で、そこにコレスキー分解の特性が現れている。