§5. 近似問題への応用–最小 2 乗近似–

この節では、関数の近似問題と連立一次方程式の近似解を求める問題を扱う。その方法にはさまざまなものが知られているが、ここで扱われるのは前節の最後に証明された最良近似ベクトルに関する定理を応用することによって近似解を求める、最もオーソドックスな方法である。

● 5-1：関数の最小 2 乗近似

次の問題を考える。

関数の近似問題 $C[a,b]$ の部分空間 W を指定しておく。このとき、閉区間 $[a,b]$ 上で定義された実数値連続関数 f を ($[a,b]$ 上で) 最も良く近似する関数を、W の中から見つけよ。

与えられた関数 f を「最も良く近似する」とは「誤差が最小である」ような関数 g を求めることであると解釈できる。各点 $x_0 \in [a,b]$ での誤差は $|f(x_0) - g(x_0)|$ であるから、「誤差が最小である」のはその「総和」が最小となることと考えるのは自然である。すなわち、

$$\int_a^b |f(x) - g(x)|\,dx$$

が最小となる W に属する連続関数 g を求めればよい。これはもっともな考え方であるが、実際に g を求めることは難しいことが多い。そこで、しばしば、$C[a,b]$ の内積

$$\langle p, q\rangle = \int_a^b p(x)q(x)\,dx \qquad (p, q \in C[a,b])$$

を使って定義される距離

$$d(f,g) = \|f - g\| = \sqrt{\int_a^b (f(x) - g(x))^2\,dx}$$

が誤差を測る量として使われる。$d(f,g)^2$ は **2 乗平均誤差**と呼ばれる。$d(f,g)$ が最小となる $g \in W$ は、W に正規直交基底が与えられれば、[定理 4-4-1] を使って求められる。

定理 5-1-1
$C[a,b]$ を $[a,b]$ 上で定義された実数値連続関数全体のなす実計量空間とし、W をその有限次元部分空間とする。このとき、任意の $f \in C[a,b]$ に対して 2 乗平均誤差 $\int_a^b (f(x)-g(x))^2\,dx$ が最小となる関数 $g \in W$ は、f の W への正射影によって与えられる。この関数 g を f の W における**最小 2 乗近似関数**と呼ぶ。

$n \in \mathbb{N}$ を固定する。$C[-\pi,\pi]$ の有限次元部分空間 W として、関数

(5-1 a) $$1,\ \cos x,\ \sin x,\ \cos 2x,\ \sin 2x,\ \ldots, \cos nx,\ \sin nx$$

によって張られる $C[-\pi,\pi]$ の部分空間を考える。(5-1 a) の関数列は一次独立であるから、$\dim W = 2n+1$ である。(5-1 a) の関数はどの 2 つも直交しているので、上記の W に対して $f \in C[-\pi,\pi]$ の最小 2 乗近似関数 g は

(5-1 b) $$\begin{aligned} g = {} & \frac{\langle f, 1\rangle}{2\pi} + \frac{\langle f, \cos x\rangle}{\pi}\cos x + \frac{\langle f, \sin x\rangle}{\pi}\sin x + \frac{\langle f, \cos 2x\rangle}{\pi}\cos 2x \\ & + \frac{\langle f, \sin 2x\rangle}{\pi}\sin 2x + \cdots + \frac{\langle f, \cos nx\rangle}{\pi}\cos nx + \frac{\langle f, \sin nx\rangle}{\pi}\sin nx \end{aligned}$$

によって求められる ([補題 3-3-1] と [例 3-2-2] を参照)。ここで、$k = 0, 1, \cdots, n$ に対して

(5-1 c) $$a_k = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f(x)\cos kx\,dx, \qquad b_k = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f(x)\sin kx\,dx$$

と定めると、(5-1 b) は次のように書き換えられる：

$$g(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{n} (a_k \cos kx + b_k \sin kx).$$

(5-1 c) によって与えられる実数 $a_0, a_1, \cdots, a_n, b_1, \cdots, b_n$ を f の**フーリエ係数**と呼ぶ。f が $f(-\pi) = f(\pi)$ を満たす連続関数であって、$[-\pi, \pi]$ を含むある区間で何回でも微分可能ならば、$[-\pi, \pi]$ 上で無限級数 $\frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \cos kx + b_k \sin kx)$ は f に (一様に) 収束する、すなわち、

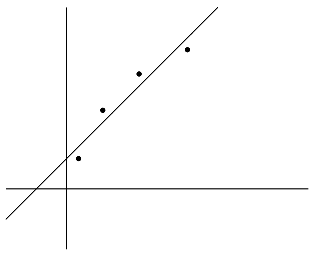
$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \cos kx + b_k \sin kx)$$

が成り立つことが知られている。この表示は f の**フーリエ級数展開**と呼ばれる。

● 5-2：解を持たない連立一次方程式を解くには

応用上、解を持たない連立一次方程式を考察しなければならないときがある。この場合、「近似解を求める」ことになる。

例えば、ある実験において、実験データが2つの実数の組 (x, y) で与えられるとし、その具体的な実験データとして $(x_1, y_1), \cdots, (x_n, y_n)$ が得られたとしよう。これらのデータを $\mathbb{R}^2$ 上の点として表わしたとき、2種類の実験データ x と y の関係が直線で近似できる場合がある。この場合、どのような直線 $y = ax + b$ が実験データに最も適合していると考えられるか、という問題を考える。仮に、すべての実験データ $(x_1, y_1), \cdots, (x_n, y_n)$ が直線 $y = ax + b$ 上に乗っていたとすると、



$$y_i = ax_i + b \qquad (i = 1, \cdots, n)$$

となる。つまり、 $a,\ b$ は連立一次方程式

(5-2 a)
$$\begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

の解として求まることになる。しかしながら、一般的に考えて、実験データ $(x_1, y_1), \cdots, (x_n, y_n)$ が同一の直線上にあるとは考えられない。つまり、どのようにベクトル $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ を選んでも差

(5-2 b)
$$\begin{pmatrix} x_1 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

を零ベクトル $\mathbf{0}$ にすることはできないと考えられる。そこで、その差を「最小」にするベクトル $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ を求め、近似直線を求めるわけである。(5-2 b) はベクトルであるから、何をもってそれを「最小」と呼ぶのか必ずしも明白ではないが、ここでは、その長さが最小になるときベクトルの差 (5-2 b) は「最小」であると考える立場をとることにしよう。

$$A = \begin{pmatrix} x_1 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_n & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

とおくと、最初の問題は

$$f(\mathbf{x}) = \|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|$$

が最小となる $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$ を求める問題に置き換えられる。

● 5-3：連立一次方程式の最小2乗解

(m, n)-行列 A を係数行列とし、m 次元ベクトル $\mathbf{b}$ を定数項ベクトルとする連立一次方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ を考える。方程式の数 m が変数の個数 n を上回わっているとすると、一般に、連立一次方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ は解を持たない。問題は $\|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|$ が最小となる $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n$ を求めることである。このようなベクトル $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n$ を与えられた連立方程式の**最小2乗解**という。

定理 5-3-1
行列 $A \in \mathrm{M}_{mn}(\mathbb{K})$ を係数行列とし、ベクトル $\mathbf{b} \in \mathbb{K}^m$ を定数項ベクトルとする連立一次方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ の最小2乗解 $\tilde{\mathbf{x}} \in \mathbb{K}^n$ は**正規方程式**

$$A^*A\tilde{\mathbf{x}} = A^*\mathbf{b} \tag{5-3 a}$$

を満たす。

注意 5-3-2 ：A の列ベクトル "$\mathbf{a}_1, \cdots, \mathbf{a}_n$" が一次独立であれば、後で示すように、$A^*A$ は正則である。したがって、この場合には、最小2乗解 $\tilde{\mathbf{x}}$ を

$$\tilde{\mathbf{x}} = (A^*A)^{-1}A^*\mathbf{b} \tag{5-3 b}$$

によって求めることができる。なお、A^*A は内積を用いて次のように表わされる：

$$A^*A = \begin{pmatrix} \langle \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_1 \rangle & \cdots & \langle \mathbf{a}_n, \mathbf{a}_1 \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_n \rangle & \cdots & \langle \mathbf{a}_n, \mathbf{a}_n \rangle \end{pmatrix}$$

例 5-3-3 連立一次方程式

$$\begin{cases} x & +3y & = & 1 \\ 2x & & = & -1 \\ x & +y & = & 2 \end{cases}$$

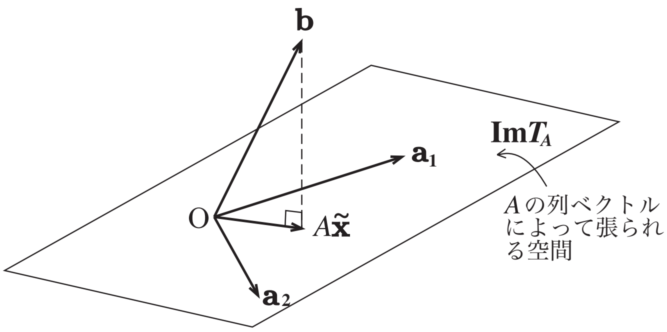
の最小2乗解を求めよう。この連立一次方程式の係数行列を A とし、$A = (\mathbf{a}_1 \ \mathbf{a}_2)$ とおくと、$A^*A = \begin{pmatrix} \langle \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_1 \rangle & \langle \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_1 \rangle \\ \langle \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2 \rangle & \langle \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_2 \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 & 4 \\ 4 & 10 \end{pmatrix}$ である。$|A^*A| = 44 \neq 0$ であるから A^*A は正則であり、逆行列は $(A^*A)^{-1} = \dfrac{1}{44}\begin{pmatrix} 10 & -4 \\ -4 & 6 \end{pmatrix} = \dfrac{1}{22}\begin{pmatrix} 5 & -2 \\ -2 & 3 \end{pmatrix}$ で与えられる。したがって、$\tilde{\mathbf{x}}$ を与えられた連立方程式の最小2乗解とすると、

$$\tilde{\mathbf{x}} = (A^*A)^{-1}A^*\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} = \frac{1}{22}\begin{pmatrix} 5 & -2 \\ -2 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 3 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{5}{22} \\ \frac{13}{22} \end{pmatrix}. \qquad \square$$

(**[定理 5-3-1] の証明**)

連立一次方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ の最小2乗解 $\tilde{\mathbf{x}}$ は n 変数関数 $f(\mathbf{x}) = \|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|$ の最小値を与える点である。$f(\mathbf{x})$ はベクトル $\mathbf{b}$ からベクトル $A\mathbf{x}$ までの距離を表しているので、これを最小にする $\mathbf{x}$ を求めることは、ベクトル $\mathbf{b}$ から T_A の像 $\mathrm{Im}\, T_A = \{ A\mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{K}^n \}$ 上の点への距離が最小になるような $\mathbf{x}$ を求めることに他ならない。

そのような点 $\tilde{\mathbf{x}}$ は、[定理4-4-1] より、$\mathbf{b}$ の $\mathrm{Im}\, T_A$ への正射影により与えられる。したがって、点 $A\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{b}$ は $\mathrm{Im}\, T_A$ に属するすべてのベクトルと直交する。すなわち、すべての $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n$ に対して
$\langle A\mathbf{x},\ A\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{b}\rangle = 0$ つまり
$\langle \mathbf{x},\ \ A^*(A\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{b})\rangle = 0$
を満たす。この式がすべての $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n$ について成立しなければならないことから、



$$A^*(A\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{b}) = \mathbf{0}$$

を得る。よって、$A^*A\tilde{\mathbf{x}} = A^*\mathbf{b}$ が示された。 □

● 5-4：内積によるベクトルの一次独立性の判定法

定理 5-4-1

$(V, \langle\ ,\ \rangle)$ を $\mathbb{K}$ 上の計量空間とし、$v_1, \cdots, v_n \in V$ とする。このとき、

$$\text{“}v_1, \cdots, v_n\text{”} \text{ が } \mathbb{K} \text{ 上一次独立} \iff n \text{ 次正方行列} \begin{pmatrix} \langle v_1, v_1\rangle & \cdots & \langle v_1, v_n\rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle v_n, v_1\rangle & \cdots & \langle v_n, v_n\rangle \end{pmatrix} \text{ が正則}$$

左辺の行列は “$v_1, \ldots, v_n$” に関する**グラム行列**と呼ばれることがある。

(**証明**)

$B = (\langle v_i, v_j\rangle)_{1\le i,j\le n}$ とおく。

$\Longrightarrow$ の証明：B の列ベクトル “$\mathbf{b}_1 = \begin{pmatrix} \langle v_1, v_1\rangle \\ \vdots \\ \langle v_n, v_1\rangle \end{pmatrix}, \cdots, \mathbf{b}_n = \begin{pmatrix} \langle v_1, v_n\rangle \\ \vdots \\ \langle v_n, v_n\rangle \end{pmatrix}$” が一次独立なことを示せばよい。

$$t_1\mathbf{b}_1 + \cdots + t_n\mathbf{b}_n = \mathbf{0} \qquad (t_1,\ \cdots, t_n \in \mathbb{K})$$

とする。

$$(\text{上式の左辺}) = \begin{pmatrix} t_1\langle v_1, v_1\rangle + \cdots + t_n\langle v_1, v_n\rangle \\ \vdots \\ t_1\langle v_n, v_1\rangle + \cdots + t_n\langle v_n, v_n\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle v_1, \overline{t_1}v_1 + \cdots + \overline{t_n}v_n\rangle \\ \vdots \\ \langle v_n, \overline{t_1}v_1 + \cdots + \overline{t_n}v_n\rangle \end{pmatrix}$$

であるから、$\langle v_j,\ \overline{t_1}v_1 + \cdots + \overline{t_n}v_n\rangle = 0\ (j = 1, \cdots, n)$ となる。よって、

$$\|\overline{t_1}v_1 + \cdots + \overline{t_n}v_n\|^2 = \overline{t_1}\langle v_1, \overline{t_1}v_1 + \cdots + \overline{t_n}v_n\rangle + \cdots + \overline{t_n}\langle v_n, \overline{t_1}v_1 + \cdots + \overline{t_n}v_n\rangle = 0$$

を得る。よって、$\overline{t_1}v_1 + \cdots + \overline{t_n}v_n = 0_V$ である。仮定により、“$v_1,\ \cdots, v_n$” は一次独立であるから $\overline{t_1} = \cdots = \overline{t_n} = 0$, すなわち、$t_1 = \cdots = t_n = 0$ を得る。

$\Longleftarrow$ の証明：B は正則であると仮定し、

$$t_1v_1 + \cdots + t_nv_n = 0_V \qquad (t_1,\ \cdots, t_n \in \mathbb{K})$$

とおく。$v_j\ (j = 1, \cdots, n)$ との内積をとり、$\overline{t_1}\langle v_j, v_1\rangle + \cdots + \overline{t_n}\langle v_j, v_n\rangle = 0$ を得る。j を 1 から n まで動かして 1 つの等式にまとめると $B\begin{pmatrix} \overline{t_1} \\ \vdots \\ \overline{t_n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$ となる。B は正則だから $\begin{pmatrix} \overline{t_1} \\ \vdots \\ \overline{t_n} \end{pmatrix} = \mathbf{0}$ となる。これより、$t_1 = \cdots = t_n = 0$ が従うから、“$v_1,\ \cdots, v_n$” は $\mathbb{K}$ 上一次独立である。 □

No.5 2025 年 5 月 12 日

線形代数 3 事前練習用演習問題

pre5-1. $[-\pi, \pi]$ 上で、$f(x) = x$ により定義される関数 f を、
$1, \cos x, \sin x, \cos 2x, \sin 2x, \cdots, \cos nx, \sin nx$ の一次結合で表わされる関数で最小 2 乗近似せよ。

pre5-2. 行列 $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$ について、以下の問いに答えよ。

(1) $A^{\mathrm{T}}A$ が正則かどうか調べよ。正則な場合には、その逆行列も求めよ。

(2) $\mathbf{b} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}$ とおく。連立 1 次方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ の最小 2 乗解を求めよ。

ヒントと略解（最初は見ずに解答してください）

---

pre5-1. $k = 0, 1, \cdots, n$ に対して $a_k = \dfrac{1}{\pi}\displaystyle\int_{-\pi}^{\pi} x \cos kx \, dx,\ b_k = \dfrac{1}{\pi}\displaystyle\int_{-\pi}^{\pi} x \sin kx \, dx$ とおくと $a_0 = 0$ であり、$k \geq 1$ ならば、部分積分法より

$$a_k = \frac{1}{\pi}\left[\frac{x \sin kx}{k} + \frac{\cos kx}{k^2}\right]_{-\pi}^{\pi} = 0$$

$$b_k = \frac{1}{\pi}\left[-\frac{x \cos kx}{k} + \frac{\sin kx}{k^2}\right]_{-\pi}^{\pi} = \frac{2(-1)^{k-1}}{k}$$

を得る。よって、x の求める最小 2 乗近似は次の関数である：

$$g(x) = \sum_{k=1}^{n} \frac{2(-1)^{k-1}}{k} \sin kx \quad (x \in [-\pi, \pi]).$$

pre5-2. (1) $A^{\mathrm{T}}A = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 2 \\ 2 & 3 & 2 \\ 2 & 2 & 3 \end{pmatrix}$ である。$(A^{\mathrm{T}}A|E_3)$ に行基本変形を施して、

$$\left(\begin{array}{ccc|rrr} 1 & 0 & 0 & \frac{5}{7} & -\frac{2}{7} & -\frac{2}{7} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{2}{7} & \frac{5}{7} & -\frac{2}{7} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{2}{7} & -\frac{2}{7} & \frac{5}{7} \end{array}\right)$$

となることがわかる。したがって、$A^{\mathrm{T}}A$ は正則であり、$A^{\mathrm{T}}A = \dfrac{1}{7}\begin{pmatrix} 5 & -2 & -2 \\ -2 & 5 & -2 \\ -2 & -2 & 5 \end{pmatrix}$ である。

(2) 連立 1 次方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ の最小 2 乗解を $\tilde{\mathbf{x}}$ とおくと、

$$\tilde{\mathbf{x}} = (A^{\mathrm{T}}A)^{-1}A^{\mathrm{T}}\mathbf{b} = \frac{1}{7}\begin{pmatrix} 8 \\ 1 \\ 15 \end{pmatrix}$$

となる。

第 5 回 (2025 年 5 月 12 日) 演習問題事前練習シート

※このシートを A4 片面 1 枚に印刷して、授業前までに事前練習用演習問題の解答をここに書いてください。略解を参照して答え合わせをしたものを授業に持参してください。但し、このシートは提出せず、各自で保管してください。

線形代数３・第５回学習内容チェックシート 2025 年 5 月 12 日

学 籍 番 号 ＿＿＿＿＿＿＿＿＿＿ 氏 名 ＿＿＿＿＿＿＿＿＿＿＿＿＿＿

Q1. 閉区間 $[a,b]$ 上で定義された実数値連続関数全体 $C[a,b]$ を、いつものように内積 $\langle\ ,\ \rangle$ を導入して実計量空間とみなす。

(1) $f, g \in C[a,b]$ の 2 乗平均誤差とは何か。

(2) $f \in C[a,b]$ とし、W をその有限次元部分空間とする。f の W における最小 2 乗近似関数を求めるには、どうすればよいか？

(3) $a = -\pi,\ b = \pi$ の場合を考える。$f \in C[-\pi,\pi]$ の関数 $f_k(x) = \cos kx, g_k(x) = \sin kx$ に関するフーリエ係数をそれぞれ a_k, b_k とおく。

(i) a_k, b_k はどんな定積分により定義されるか？

$a_k =$ ＿＿＿＿＿＿＿＿＿＿, $b_k =$ ＿＿＿＿＿＿＿＿＿＿.

(ii) 関数 $g(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{n} (a_k \cos kx + b_k \sin kx)$ $(x \in [-\pi,\pi])$ は、$C[-\pi,\pi]$ のどのような有限次元部分空間における f の最小 2 乗近似関数になるか？

Q2. (m,n)-行列 A を係数行列とし、$\mathbf{b} \in \mathbb{K}^m$ を定数項ベクトルとする連立一次方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ を考える。

(1) 上の連立一次方程式の最小 2 乗解とはどんな「解」を指すか？説明せよ。

(2) A の列ベクトルからなるベクトルの組が一次独立であるとき、連立一次方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ の最小 2 乗解を求める方法を述べよ。

Q3. $(V, \langle\ ,\ \rangle)$ を $\mathbb{K}$ 上の計量空間とし、$v_1, \cdots, v_n \in V$ とする。“$v_1, \cdots, v_n$” に関するグラム行列を G とおく。

(1) G はどんな行列か？

$G =$

(2) “$v_1, \cdots, v_n$” が $\mathbb{K}$ 上一次独立であるための必要十分条件をグラム行列 G を用いて述べよ。

Q4. 第 5 回の授業で学んだ事柄について、わかりにくかったことや考えたことなどがあれば、書いてください。