最小二乗法

図 1

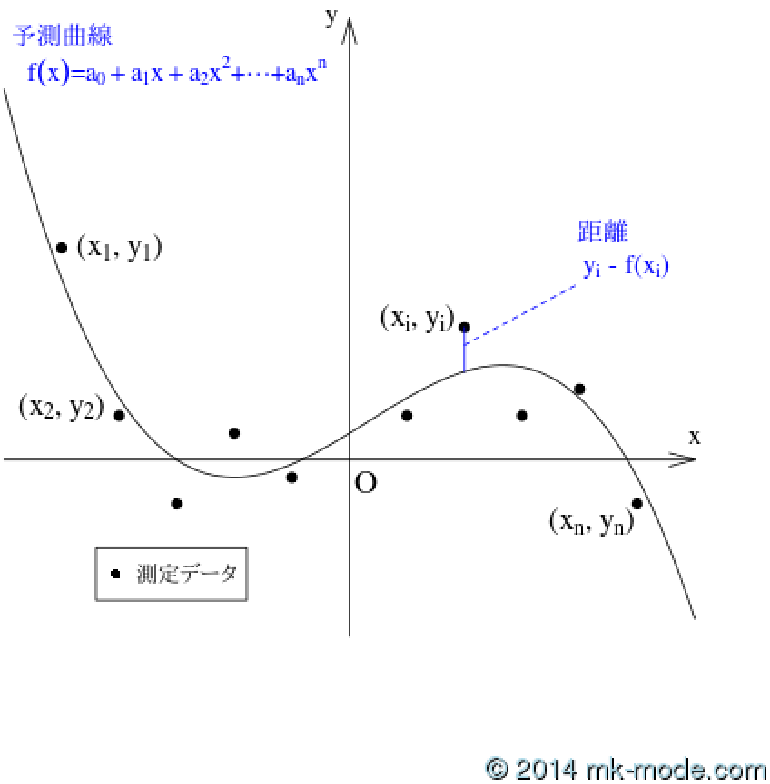

図 1 のような n 組の測定データ $(x_i, y_i)(i = 1, 2, \cdots, n)$ があるとする。これらのデータに沿う近似方程式として

$$f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_mx^m$$

を考え、この方程式と測定データとの 2 乗和 $\displaystyle\sum_{i=1}^{n}(y_i - f(x_i))^2$ が最小となるように係数 a_0 〜a_m を求めるのが**最小二乗法**の考え方である。これは次の連立方程式を解くことにより得られる。（なお、m は予測曲線の次数）

$$\begin{cases} s_0a_0 + s_1a_1 + s_2a_2 + s_3a_3 + & \cdots + s_ma_m & = t_0 \\ s_1a_0 + s_2a_1 + s_3a_2 + s_4a_3 + & \cdots + s_{m+1}a_m & = t_1 \\ s_2a_0 + s_3a_1 + s_4a_2 + s_5a_3 + & \cdots + s_{m+2}a_m & = t_2 \\ \quad\vdots & & \\ s_ma_0 + s_{m+1}a_1 + s_{m+2}a_2 + & \cdots + s_{2m}a_m & = t_m \end{cases}$$

ただし、

$$s_0 = \sum_{j=1}^{n} x_j^0,\ s_1 = \sum_{j=1}^{n} x_j^1,\ \cdots,\ s_{2m} = \sum_{j=1}^{n} x_j^{2m}$$

$$t_0 = \sum_{j=1}^{n} y_jx_j^0,\ t_1 = \sum_{j=1}^{n} y_jx_j^1,\ \cdots,\ t_m = \sum_{j=1}^{n} y_jx_j^m$$

あとは、この連立方程式をガウス・ジョルダン法で解けばよい。