パターン認識

ー最小二乗法と回帰計算ー

担当:和田　俊和
部屋　A513
Email　twada@ieee.org
講義資料はhttp://wada1.sys.wakayama-u.ac.jp/PR/

直交関数展開は最小二乗法

最小二乗の問題

- 未知の関数を $f(x)$ とし，$f^*(x) = \sum_{i=1}^{N} c_i \varphi_i(x)$ という形式でこの関数を近似する．
- このとき，下記の式の値を最小化する c_i を求める問題が最小二乗法である．

$$\int_a^b \left(f(x) - f^*(x) \right)^2 dx$$

内積の定義

- 次式を$f(x)$と$g(x)$の内積と定義する．

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

- このとき，最小化する目的値は

$$\int_a^b \left(f(x)-f^*(x)\right)^2 dx = \| f(x)-f^*(x) \|^2$$

$$= \| f(x)-\sum_{i=1}^{N} c_i \varphi_i(x) \|^2$$

$$= \| f(x) \|^2 - 2(f(x), \sum_{i=1}^{N} c_i \varphi_i(x)) + \| \sum_{i=1}^{N} c_i \varphi_i(x) \|^2$$

連立方程式の導出1

- これをc_iで偏微分しそれを0と置くことによって次式を得る.

$$\frac{\partial}{\partial c_k} \| f(x) - \sum_{i=1}^{N} c_i \varphi_i(x) \|^2$$

$$= \frac{\partial}{\partial c_k} \left(\| f(x) \|^2 - 2\left(f(x), \sum_{i=1}^{N} c_i \varphi_i(x)\right) + \| \sum_{i=1}^{N} c_i \varphi_i(x) \|^2 \right)$$

$$= -2(f(x), \varphi_k(x)) + 2\left(\varphi_k(x), \sum_{i=1}^{N} c_i \varphi_i(x)\right) = 0$$

連立方程式の導出2

- したがって

$$\sum_{i=1}^{N} c_i(\varphi_k(x), \varphi_i(x)) = (f(x), \varphi_k(x))$$

- が成り立つので,

$$\begin{pmatrix} (\varphi_1, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_1, \varphi_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (\varphi_N, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_N, \varphi_N) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\varphi_1, f) \\ \vdots \\ (\varphi_N, f) \end{pmatrix}$$

- を解けばいい.

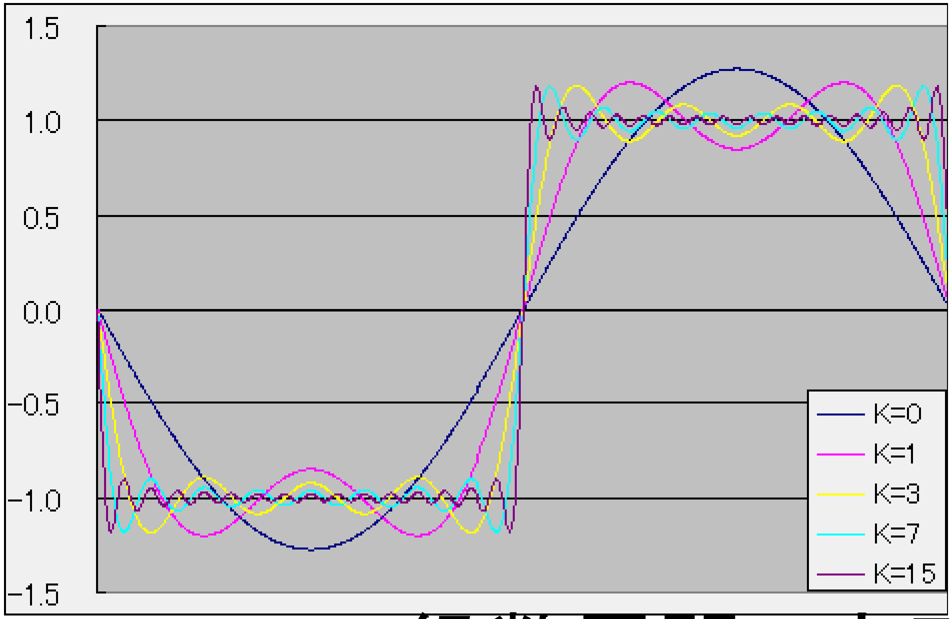
$\varphi(x)$を正規直交関数に選んだ場合

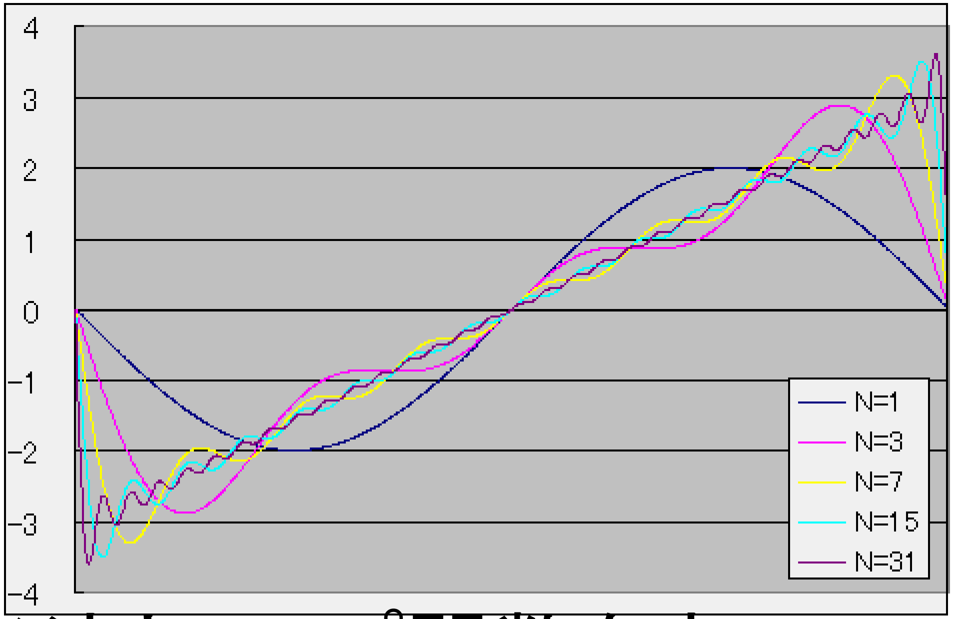
- この場合，

$$
\begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}
\begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_N \end{bmatrix}
=
\boxed{
\begin{bmatrix} (\varphi_1, f) \\ \vdots \\ (\varphi_N, f) \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_N \end{bmatrix}
}
$$

となり，連立方程式を解かなくてよい．

このことから，直交関数展開は最小二乗法であると言える





Fourier級数展開で方形波とランプ関数を表現した例．元の形状に近づいている．

中間まとめ

- ここまでの内容は，任意の x における $f(x)$ の実測値が分かっている場合の最小二乗法であった．
- 実際には，密に実測値が得られることはまれであるため，異なる定式化が用いられる．

最小二乗の別の定式化

- 未知関数$f(x)$のサンプル点を$f(x_1),\cdots,f(x_M)$とし，

$$f^*(x)=\sum_{i=1}^{N}c_i\varphi_i(x)$$

という形式でこの関数を近似する.

- このとき，下記の式の値を最小化するc_iを求める問題も最小二乗法である.

$$\sum_{k=1}^{M}\left(f(x_k)-f^*(x_k)\right)^2$$

解法

- c_i で偏微分して0と置くことで次式を得る.

$$\frac{\partial}{\partial c_n}\sum_{k=1}^{M}\left(f(x_k)-\sum_{i=1}^{N}c_i\varphi_i(x_k)\right)^2$$

$$=-2\sum_{k=1}^{M}f(x_k)\varphi_n(x_k)+2\sum_{k=1}^{M}\varphi_n(x_k)\sum_{i=1}^{N}c_i\varphi_i(x_k)=0$$

連立方程式へ

- したがって，次式が成り立つ．

$$\sum_{i=1}^{N} c_i \sum_{k=1}^{M} \varphi_n(x_k)\varphi_i(x_k) = \sum_{k=1}^{M} f(x_k)\varphi_n(x_k)$$

- 連立方程式は以下の通り．

$$\begin{bmatrix} \sum_{k=1}^{M} \varphi_1(x_k)\varphi_1(x_k) & \cdots & \sum_{k=1}^{M} \varphi_1(x_k)\varphi_N(x_k) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{k=1}^{M} \varphi_N(x_k)\varphi_1(x_k) & \cdots & \sum_{k=1}^{M} \varphi_N(x_k)\varphi_1(x_k) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^{M} f(x_k)\varphi_1(x_k) \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^{M} f(x_k)\varphi_N(x_k) \end{bmatrix}$$

多変量の場合はどうなるか？

- 通常は, x のみがベクトル化されるのが多変量解析と呼ばれる手法である. 本質的に同じ方程式（ベクトルからスカラーへの写像）

$$
\begin{bmatrix}
\sum_{k=1}^{M} \varphi_1(\boldsymbol{x}_k)\varphi_1(\boldsymbol{x}_k) & \cdots & \sum_{k=1}^{M} \varphi_1(\boldsymbol{x}_k)\varphi_N(\boldsymbol{x}_k) \\
\vdots & \ddots & \vdots \\
\sum_{k=1}^{M} \varphi_N(\boldsymbol{x}_k)\varphi_1(\boldsymbol{x}_k) & \cdots & \sum_{k=1}^{M} \varphi_N(\boldsymbol{x}_k)\varphi_1(\boldsymbol{x}_k)
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_N \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
\sum_{k=1}^{M} f(\boldsymbol{x}_k)\varphi_1(\boldsymbol{x}_k) \\
\vdots \\
\sum_{k=1}^{M} f(\boldsymbol{x}_k)\varphi_N(\boldsymbol{x}_k)
\end{bmatrix}
$$

問題点

- 推定される出力間の関係を無視している.
- 回避策1: 入出力の直積空間内で主成分分析を行い, 低い次元数の超平面を求める. これが, 回帰平面になる.
  - レポート: これはどんな場合でも最小二乗法と同じであるか?