最小二乗法のしくみ

1、最小二乗法とは？

- 未知量 $\mathbf{X}$ と観測量 $\mathbf{L}$ とが下記のように線形の関係で与えられている時、 観測 $\mathbf{L}$ を行うことにより、未知量 $\mathbf{X}$ を求めたい。

$$\mathbf{L}=\begin{bmatrix}\ell_1\\ \ell_2\\ \vdots\\ \ell_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m}\\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ \vdots\\ x_m\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}d_1\\ d_2\\ \vdots\\ d_2\end{bmatrix}=\mathbf{AX}+\mathbf{D}$$

- 数学的には、未知数の数だけ観測があれば、

すなわち $n=m$ であれば式は解け、$\mathbf{X}$ が求まる。

- しかし、現実には、難しい問題がある。
- 観測量 $\mathbf{L}$ は、数学的な量ではなく、実際の観測値には誤差が含まれているということ。
- 観測数が未知数の数を上回る、すなわち $n \rangle m$ の場合が現実には多いということである。（余剰観測の存在）
- すると式 $\mathbf{L} = \mathbf{AX} + \mathbf{D}$ は、解不定という状態に陥ってしまう。
- これを解決する方法の一つとして考え出されたのが最小二乗法である。

観測で距離求める簡単な問題を考えてみよう。

距離 x

誤差がない世界

ℓ

ℓ

$\vdots$

ℓ

何回測定しても観測値は同じ。

距離 $x = \ell$

誤差のある現実の世界

ℓ_1

ℓ_2

$\vdots$

ℓ_n

観測の度に観測値は異なる。

距離 $x = \ell_1$? 、 ℓ_2?、 ℓ_n?

このように観測誤差と余剰な観測のため解が一つに決まらない（解不定）

↓

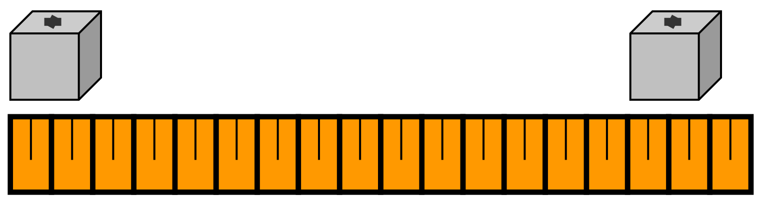
このような問題を解くための方法の一つが最小二乗法である。

↓

すべての観測値を使って未知量をただ一つ推定するために、「最小二乗の条件」を導入して解く方法が考え出された。

「最小二乗の条件」の導出

距離観測の例で



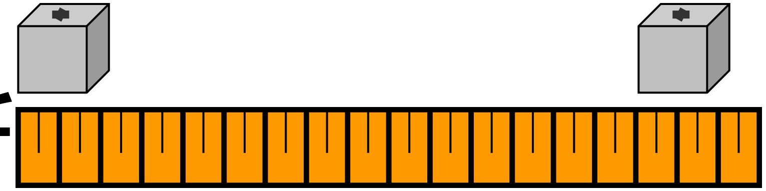
l_1

l_2

$\vdots$

l_n

もし観測値が正規分布に従うと仮定したら①？



ここで距離の観測値が正規分布に従うとしよう。 各観測 l_iの平均値は μ で、その分散は σ_i^2 であるとすると、観測値が l_i と $l_i + dl_i$ の間の値になる確率 P_i は次のようになる。

$$P_i = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_i} \exp\left(-\frac{(l_i - \mu)^2}{2\sigma_i^2} \right) dl_i$$

すると一連のn個の観測値 $l_1, l_2, \ldots l_i, \ldots, l_n$ が得られる確率 P は

$$P = P_1 \cdot P_2 \cdots\cdots P_i \cdots\cdots P_n$$

で表される。

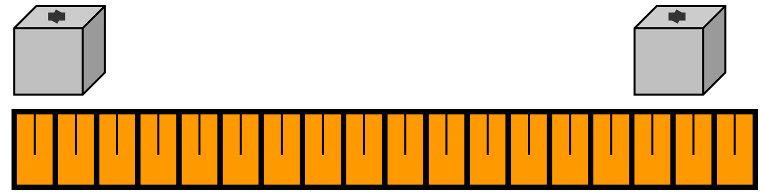
正規分布とは？

観測値のばらつき具合を説明する確率密度関数として広く使われている。その密度関数は、次のように表わせる。

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2} \right)$$

正規分布の確率密度関数

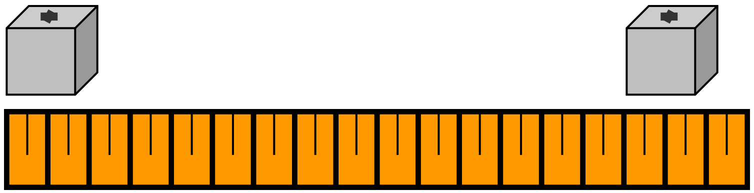
μ は平均、σ² は分散。



P を具体的に表せば次のようになる。

$$P = P_1 \cdot P_2 \cdots\cdots P_n \propto \Pi_{i=1}^{n}\left(\frac{1}{\sigma_i\sqrt{2\pi}}\right)e^{-(1/2)(\frac{(l_1-\mu)^2}{\sigma_1^2}+\frac{(l_2-\mu)^2}{\sigma_2^2}+\cdots+\frac{(l_n-\mu)^2}{\sigma_n^2})}$$

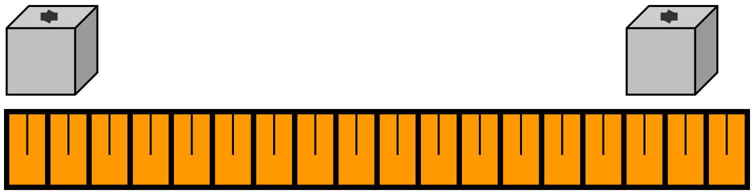
この確率は、 μ の値により変化するが、この確率を最大にする μ が最も可能性の高い距離の推定値であり、求める解であると考える。



p を最大にするためには、その指数部が最小でなければならないから、次の条件

$$\frac{(l_1-\mu)^2}{\sigma_1^2}+\frac{(l_2-\mu)^2}{\sigma_2^2}+\cdots+\frac{(l_n-\mu)^2}{\sigma_n^2}=\sum_{i=1}^{n}\frac{(l_i-\mu)^2}{\sigma_i^2}\equiv \text{最小}$$

が得られる。



ここで観測の重み p_i を導入し、重みと分散の関係 $p \propto \dfrac{1}{\sigma^2}$

を考慮すると、この条件は

$$\sum_{i=1}^{n} p_i (l_i - \mu)^2 \equiv \text{最小}$$

と書ける。 さらに残差 $v_i = \ell_i - \mu$ を導入すれば、

$$\sum_{i=1}^{n} p_i {v_i}^2 \equiv \text{最小}$$

と書ける。
これが「最小二乗の条件」と呼ばれているものである。

ここでは、観測値が正規分布に従うとして、

「最小二乗の条件」を導いたが、観測値の分布に関して特別な仮定を設けない場合でも、この

「最小二乗の条件」は未知量を推定するかなり良い条件であることが分かっている。

「最小二乗の条件」を使った最小二乗法は、

①線形の推定で

②統計的に偏りのない推定であり、

③最小の分散を与える推定で

あることが分かっている。（詳細は「観測と最小二乗法」を参照）

最小二乗法は、この「最小二乗の条件」を使って、解を推定する計算手法である。

これにより、観測値はばらつき（誤差を持ち）、

たくさんの余剰な観測があるため、解がひとつに決まらないという状態（解不定）から脱することができるのである。

最小二乗法の手順

- 観測量と未知量との関係が分かっていること。
  （数学モデルが明らか）
- 観測の精度がわかっていること。
  （統計モデルが明らか）

観測の分散　あるいは観測の重みが既知

- 以上の前提で
- 「最小二乗の条件」を使って　最も確からしい

未知量を推定するのが、最小二乗法である。

最小二乗法

数学モデル

観測量と未知量との関係式

統計モデル

観測がどの程度の精度で行われたかを示すもの。:観測の分散

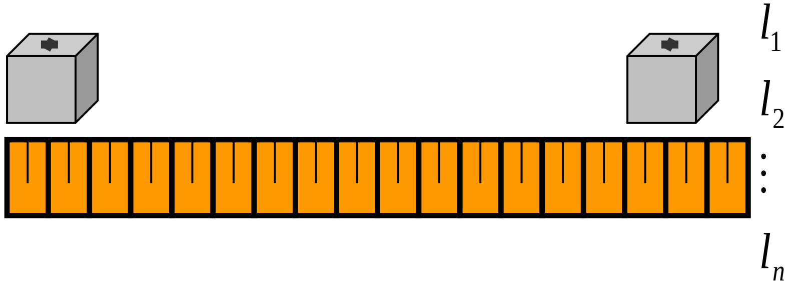
最小二乗の条件

未知量の推定

2、最小二乗法の定式化

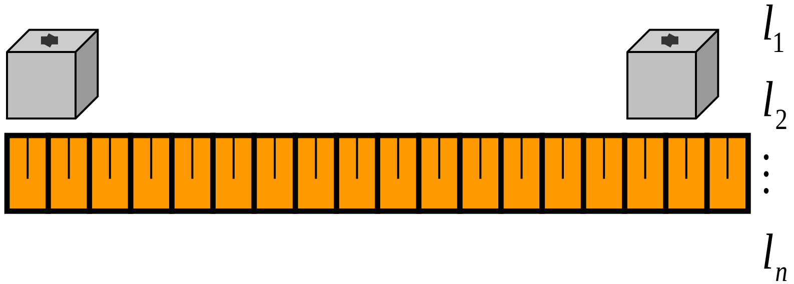
簡単な例での定式化

簡単な最小二乗の例



距離を n 回測定して $l_1, l_2, \cdots, l_n$ を得た。各観測は独立して行われその標準偏差がそれぞれ $\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_n$ である時、これらの観測値から距離を推定せよ。

簡単な最小二乗の例



今最小二乗法で推定する距離を　x　としよう。
観測値には誤差がある。この誤差に相当する量を観測値に修正してやれば、正しい距離になる。
この修正量を　$v_1, v_2, \cdots, v_n$　とすれば

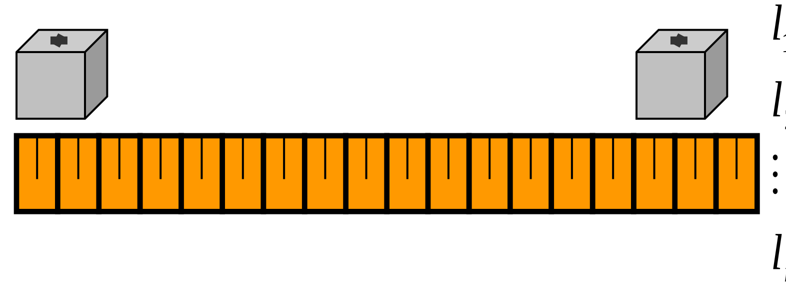
$$l_1 + v_1 = x$$
$$l_2 + v_2 = x$$
$$\cdots$$
$$l_n + v_n = x$$

$\Rightarrow$

$$v_1 = x - l_1$$
$$v_2 = x - l_2$$
$$\cdots$$
$$v_n = x - l_n$$

と書ける。　$v_1, v_2, \cdots, v_n$　は残差で、
右の式は、観測方程式と呼ばれている。

簡単な最小二乗の例



最小二乗の条件は、

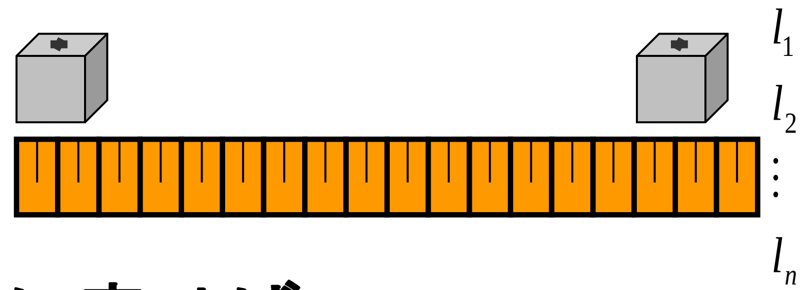
$$p_1 v_1^2 + p_2 v_2^2 + \cdots + p_n v_n^2 \quad \equiv \text{最小}$$

となる。 ここで重み $p_1, p_2, \cdots, p_n$ は、観測の分散と次式の関係にある。

$$p_i = \sigma_0^2 / \sigma_i^2 \qquad (i = 1, n)$$

σ_0^2 は比例定数（基準分散）

簡単な最小二乗の例



最小二乗の条件を具体的に表せば、

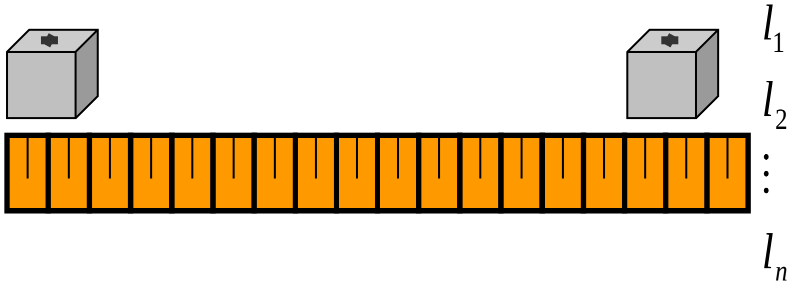
$$\phi = p_1 v_1^2 + p_2 v_2^2 + \cdots + p_n v_n^2$$

$$= p_1(x-l_1)^2 + p_2(x-l_2)^2 + \cdots + p_n(x-l_n)^2 \quad \equiv \text{最小}$$

である。 この x についての2次関数が最小になるのは、この微分式がゼロになる場合である（関数は放物線であり、これが最小になるのは、x が頂点にいるときであり、その時接線の傾きはゼロ）。

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$$

簡単な最小二乗の例



微分式を計算すると

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 2p_1(x-\ell_1) + 2p_2(x-\ell_2) + \cdots + 2p_n(x-l_n) = 0$$

である。 これから、正規方程式と呼ばれる

$$\boxed{(p_1 + p_2 + \cdots + p_n)x = p_1 l_1 + p_2 l_2 + \cdots + p_n l_n}$$

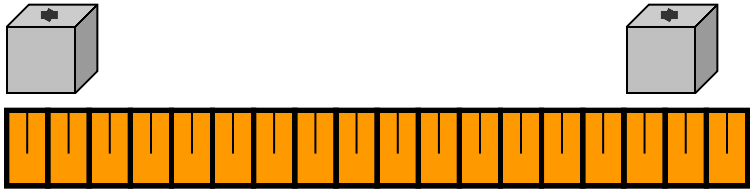
が得られ、これを解くと未知量　x　は

$$\boxed{x = \frac{p_1 l_1 + p_2 l_2 + \cdots + p_n l_n}{p_1 + p_2 + \cdots + p_n}}$$

となる。すなわちこの場合、観測値の重みつき平均値が、距離の推定値ということになる。

同じことを行列式を使って計算すると？

距離観測の例(行列形)

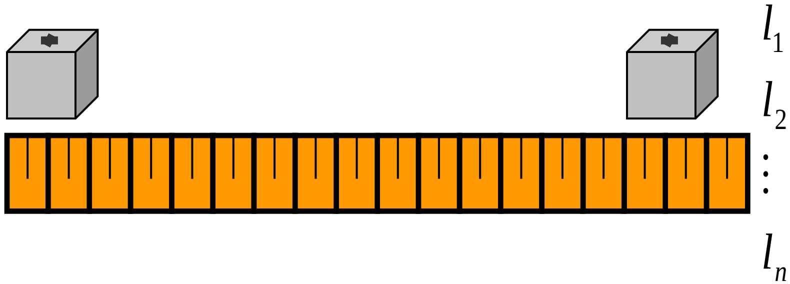


数学モデル

$$\mathbf{L} = \mathbf{X}$$

$$\begin{bmatrix} \ell_1 \\ \ell_2 \\ \vdots \\ \ell_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ x \\ \vdots \\ x \end{bmatrix}$$

距離観測の例（行列形）



統計モデル

分散行列

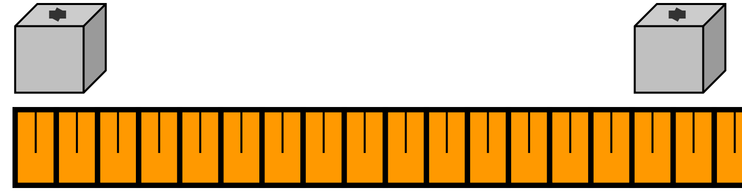
$$\Sigma_\ell = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_n^2 \end{bmatrix}$$

重み行列

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} p_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & p_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_n \end{bmatrix}$$

$$= \sigma_0^2 \Sigma_\ell^{-1} = \begin{bmatrix} \sigma_0^2/\sigma_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_0^2/\sigma_2^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sigma_0^2/\sigma_n^2 \end{bmatrix}$$

距離観測の例（行列形）



l_1

l_2

$\vdots$

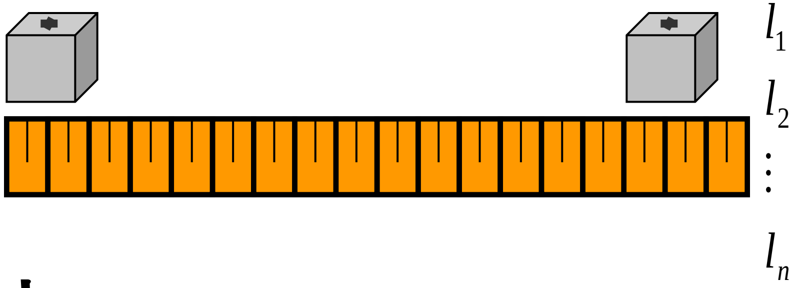
l_n

観測方程式 $\quad \mathbf{v} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{w}$

$$
\begin{aligned}
l_1 + v_1 &= x \\
l_2 + v_2 &= x \\
&\cdots \\
l_n + v_n &= x
\end{aligned}
\quad \Rightarrow \quad
\begin{aligned}
v_1 &= x - l_1 \\
v_2 &= x - l_2 \\
&\cdots \\
v_n &= x - l_n
\end{aligned}
\quad \Rightarrow \quad
\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} [x] - \begin{bmatrix} l_1 \\ l_2 \\ \vdots \\ l_n \end{bmatrix}
$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{w}$$

距離観測の例(行列形)



最小二乗の条件を行列で表すと

$$p_1 v_1^2 + p_2 v_2^2 + \cdots + p_n v_n^2$$

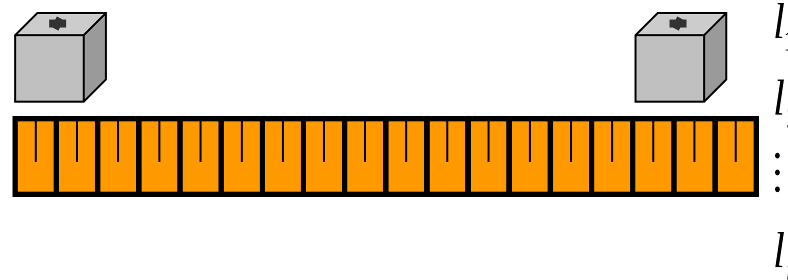
$$= \begin{bmatrix} v_1 & v_2 & \cdots & v_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & p_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} = \mathbf{v}^{\mathbf{T}}\mathbf{P}\mathbf{v} \quad \equiv \text{最小}$$

となる。

最小二乗の条件

$$\mathbf{v}^{T}\mathbf{P}\mathbf{v} \equiv \text{最小}$$

距離観測の例（行列形）

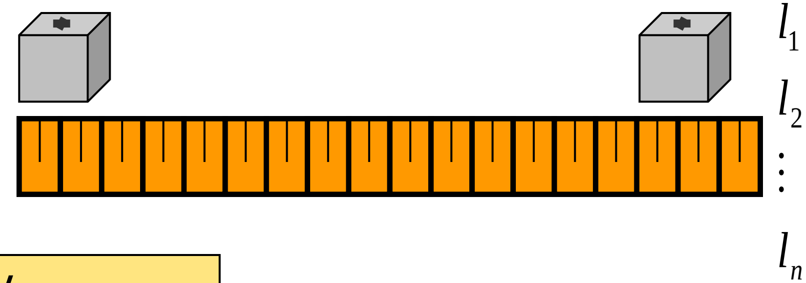


$\phi = \mathbf{v}^T \mathbf{P} \mathbf{v}$ の計算

$$\mathbf{v} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{w}$$

$$\begin{aligned}
\phi = \mathbf{v}^T \mathbf{P} \mathbf{v} &= (\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{w})^{\mathrm{T}} \mathbf{P} (\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{w}) \\
&= (\mathbf{x}^{\mathrm{T}} \mathbf{A}^{\mathrm{T}} + \mathbf{w}^{\mathrm{T}})(\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{w}) \\
&= \mathbf{x}^{\mathrm{T}} \mathbf{A}^{\mathrm{T}} \mathbf{P} \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{x}^{\mathrm{T}} \mathbf{A}^{\mathrm{T}} \mathbf{P} \mathbf{w} + \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{P} \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{P} \mathbf{w}
\end{aligned}$$

距離観測の例（行列形）



$$\phi = \mathbf{v}^T \mathbf{P} \mathbf{v} \equiv 最小$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{0}$$

$$\phi = \mathbf{x}^{\mathrm{T}} \mathbf{A}^{\mathrm{T}} \mathbf{P} \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{x}^{\mathrm{T}} \mathbf{A}^{\mathrm{T}} \mathbf{P} \mathbf{w} + \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{P} \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{P} \mathbf{w}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}} = 2\mathbf{x}^{\mathrm{T}} \mathbf{A}^{\mathrm{T}} \mathbf{P} \mathbf{A} + (\mathbf{A}^{\mathrm{T}} \mathbf{P} \mathbf{w})^{\mathrm{T}} + \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{P} \mathbf{A}$$

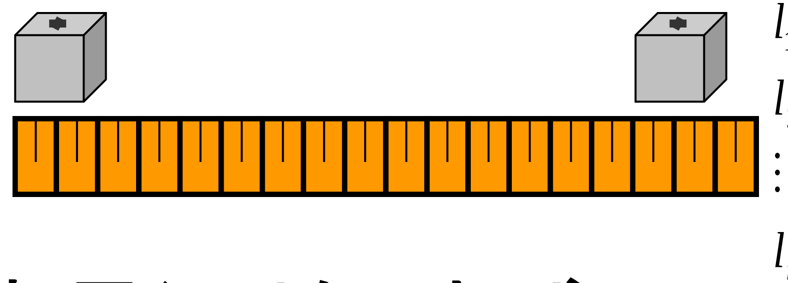
$$= 2\mathbf{x}^{\mathrm{T}} \mathbf{A}^{\mathrm{T}} \mathbf{P} \mathbf{A} + 2\mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{P} \mathbf{A} = \mathbf{0}$$

ベクトルの微分法則

$$\phi_1 = \mathbf{A}\mathbf{x} \qquad \phi_2 = \mathbf{x}^{\mathrm{T}} \mathbf{A} \qquad \phi_3 = \mathbf{x}^{\mathrm{T}} \mathbf{A} \mathbf{x}$$

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{A} \qquad \frac{\partial \phi_2}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{A}^{\mathrm{T}} \qquad \frac{\partial \phi_3}{\partial \mathbf{x}} = 2\mathbf{x}^{\mathrm{T}} \mathbf{A}$$

距離観測の例（行列形）



$$\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}} = 2\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A} + 2\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A} = \mathbf{0}$$ の転置行列を取れば

転置行列の法則　$(\mathbf{AB})^{\mathrm{T}} = \mathbf{B}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}$　　$(\mathbf{ABC})^{\mathrm{T}} = \mathbf{C}^{\mathrm{T}}\mathbf{B}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}$

正規方程式が得られる。

$$\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{w} = \mathbf{0}$$

この式に相当

$$(p_1 + p_2 + \cdots + p_n)x = p_1 l_1 + p_2 l_2 + \cdots + p_n l_n$$

正規方程式

$$\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A}\mathbf{x}+\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{w}=\mathbf{0}$$

を解くと
解は、以下
のようになる。

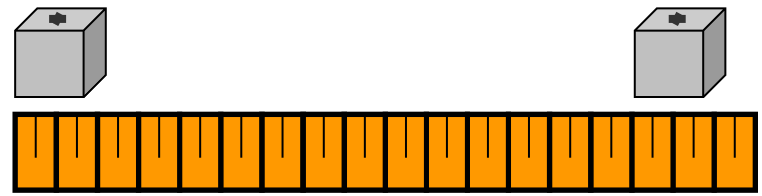
解

$$\hat{\mathbf{x}}=-(\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{w}$$

$\Downarrow$ この式に相当

$$x=\frac{p_1l_1+p_2l_2+\cdots+p_nl_n}{p_1+p_2+\cdots+p_n}$$

距離観測の例(行列形)



最小二乗解　$\hat{\mathbf{x}} = -(\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{w}$

$$\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & p_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^{n} p_i$$

$$\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{w} = -\begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & p_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_1 \\ l_2 \\ \vdots \\ l_4 \end{bmatrix} = -\sum_{i=1}^{n} p_i l_i$$

$$\hat{x} = \frac{\sum_{i=1}^{n} p_i l_i}{\sum_{i=1}^{n} p_i}$$

最小二乗法の定式化

観測量と未知量との関係：線形の場合

観測量と未知量との関係:線形の場合　①

観測量

$$\ell = \begin{bmatrix} \ell_1 \\ \ell_2 \\ \vdots \\ \ell_n \end{bmatrix}$$

未知量

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_u \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{L} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{d}$$

数学モデル

$$\mathbf{L} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{d}$$

$$\begin{bmatrix} \ell_1 \\ \ell_2 \\ \vdots \\ \ell_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_2 \end{bmatrix}$$

観測量と未知量との関係：線形の場合　①

観測量

$$\ell = \begin{bmatrix} \ell_1 \\ \ell_2 \\ \vdots \\ \ell_n \end{bmatrix}$$

未知量

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_u \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{L} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{d}$$

数学モデル

$$\mathbf{L} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{d}$$

$$\begin{bmatrix} \ell_1 \\ \ell_2 \\ \vdots \\ \ell_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_2 \end{bmatrix}$$

観測量と未知量との関係：線形の場合　②

観測誤差（残差）を導入して数学モデルを書き換える

数学モデル

$$\mathbf{L} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{d}$$

観測量＝観測値＋残差

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_{ob} + \mathbf{v}$$

観測方程式

$$\mathbf{v} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{w}$$

$$\mathbf{w} = \mathbf{d} - \mathbf{L}_{ob}$$

観測量と未知量との関係:線形の場合　③

観測方程式

$$\mathbf{v} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{w}$$

観測値の
分散と重み　$\sum_{\mathbf{L}_{ob}}$

$$\mathbf{P} = \sigma_0^2 \sum\nolimits_{\mathbf{L}_{ob}}^{-1}$$

最小二乗の条件の適用

$$\mathbf{v}^T \mathbf{P} \mathbf{v} \equiv \text{最小}$$

観測量と未知量との関係：線形の場合　④

$\phi = \mathbf{v}^T \mathbf{P} \mathbf{v}$ の計算

$$\mathbf{v} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{w}$$

$$\begin{aligned}
\phi = \mathbf{v}^T \mathbf{P} \mathbf{v} &= (\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{w})^{\mathrm{T}} \mathbf{P} (\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{w}) \\
&= (\mathbf{x}^{\mathrm{T}} \mathbf{A}^{\mathrm{T}} + \mathbf{w}^{\mathrm{T}})(\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{w}) \\
&= \mathbf{x}^{\mathrm{T}} \mathbf{A}^{\mathrm{T}} \mathbf{P} \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{x}^{\mathrm{T}} \mathbf{A}^{\mathrm{T}} \mathbf{P} \mathbf{w} + \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{P} \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{P} \mathbf{w}
\end{aligned}$$

観測量と未知量との関係：線形の場合　⑤

$$\phi = \mathbf{v}^T \mathbf{P}\mathbf{v} \equiv 最小$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{0}$$

$$\phi = \quad \mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{w} + \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{w}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}} = 2\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A} + (\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{w})^{\mathrm{T}} + \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A}$$

$$= 2\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A} + 2\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A} = \mathbf{0}$$

ベクトルの微分法則

$$\phi_1 = \mathbf{A}\mathbf{x} \qquad \phi_2 = \mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{A} \qquad \phi_3 = \mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{x}$$

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{A} \qquad \frac{\partial \phi_2}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{A}^{\mathrm{T}} \qquad \frac{\partial \phi_3}{\partial \mathbf{x}} = 2\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}$$

観測量と未知量との関係：線形の場合 ⑥

$$\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}} = 2\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{PA} + 2\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{PA} = \mathbf{0}$$ の転置行列を取れば

正規方程式

$$\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{PAx} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{Pw} = \mathbf{0}$$

解

$$\hat{\mathbf{x}} = -(\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{PA})^{-1}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{Pw}$$

観測量と未知量との関係：線形の場合　⑦

まとめ

数学モデル　$L = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{d}$

統計モデル　$\Sigma_{\mathbf{L_{ob}}} \quad \mathbf{P} = \sigma_0^2 \Sigma_{\mathbf{L}_{ob}}^{-1}$

観測方程式　$\mathbf{v} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{w}$

$\mathbf{L} = \mathbf{L}_{ob} + \mathbf{v}$

$\mathbf{w} = \mathbf{d} - \mathbf{L}_{ob}$

最小二乗解　$\hat{\mathbf{x}} = -(\mathbf{A}^{T}\mathbf{P}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^{T}\mathbf{P}\mathbf{w}$

最小二乗法の定式化

観測量と未知量との関係：非線形の場合

数学モデルが非線形の場合①

数学モデルが $\mathbf{L} = f(\mathbf{x})$ のように非線形の場合は、最小二乗法が適用できるように $\mathbf{L} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{d}$ の形に線形化すればよい。

数学モデルの線形化

$$\mathbf{L} = f(\mathbf{x}) \Rightarrow \mathbf{L} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{d}$$

数学モデルが非線形の場合②

線形化の手順

未知量＝概略値＋補正量　$\mathbf{x} = \mathbf{x_0} + \Delta\mathbf{x}$

と分け、補正量が微小量である事を考慮してモデル式をテイラー展開し線形化する。

$$\boxed{\mathbf{L} = \mathbf{f(x)}}$$

$$\Downarrow$$

$$\mathbf{L} = \mathbf{f(x_0 + \Delta x)} \cong \mathbf{f(x_0)} + \left.\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}\right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x_0}} \cdot \Delta\mathbf{x}$$

$$\therefore \quad \boxed{\mathbf{L} = \mathbf{A} \cdot \Delta\mathbf{x} + \mathbf{d}}$$

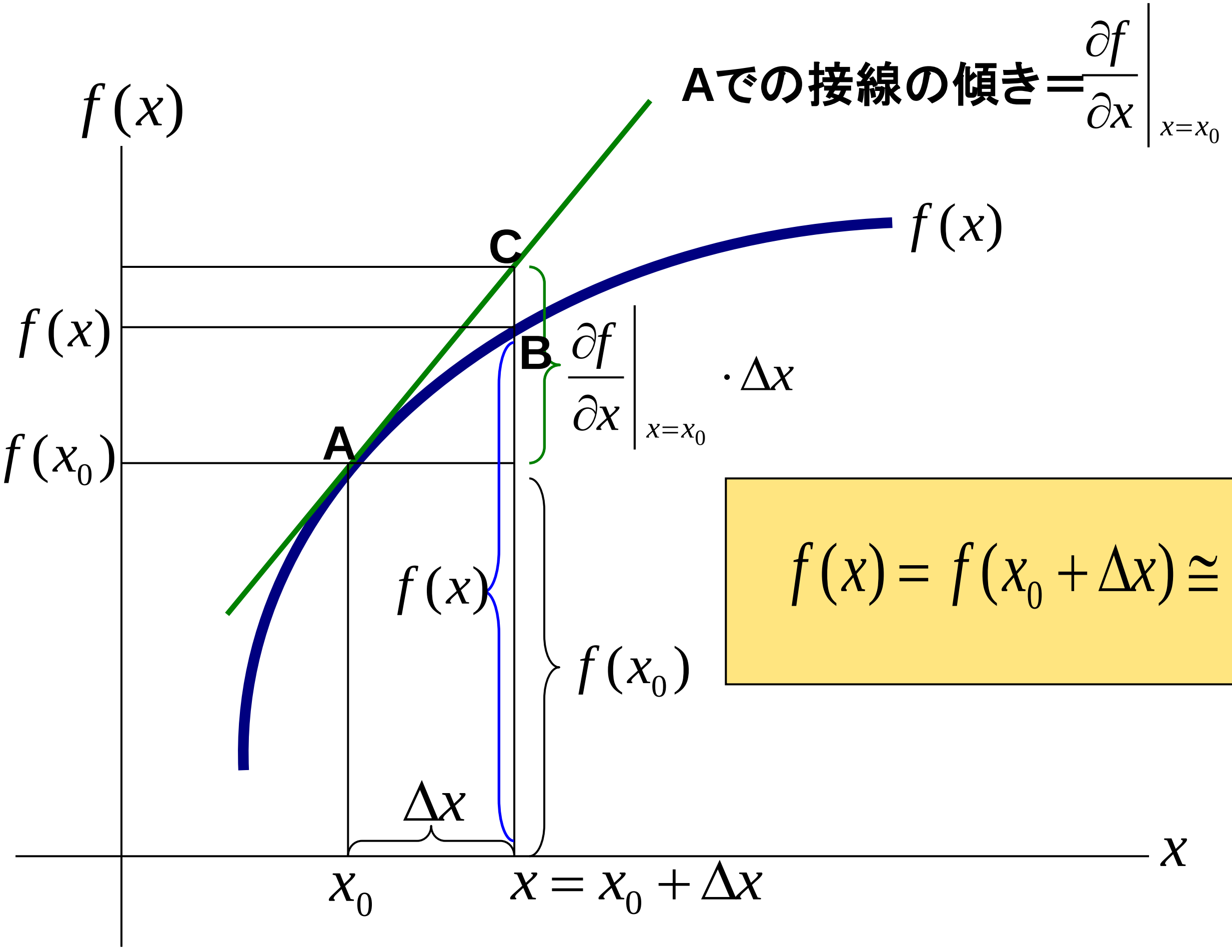
ここで

$$\mathbf{A} = \left.\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}\right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x_0}}$$

$$\mathbf{d} = \mathbf{f(x_0)}$$

数学モデルが非線形の場合③

テイラー展開の意味



$$f(x) = f(x_0 + \Delta x) \cong f(x_0) + \left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{x=x_0} \Delta x$$

数学モデルが非線形の場合④

まとめ

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_{\mathbf{ob}} + \mathbf{v}$$ とすると

$$\mathbf{L}_{\mathbf{ob}} + \mathbf{v} = \mathbf{A} \cdot \Delta\mathbf{x} + \mathbf{d}$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{A} \cdot \Delta\mathbf{x} + (\mathbf{d} - \mathbf{L}_{\mathbf{ob}})$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{A} \cdot \Delta\mathbf{x} + \mathbf{w} \qquad : \mathbf{w} = \mathbf{d} - \mathbf{L}_{\mathbf{ob}}$$

結局、観測方程式を線形の場合と同じ形　$\mathbf{v} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{w}$
にすることができた。

観測方程式　$$\mathbf{v} = \mathbf{A} \cdot \Delta\mathbf{x} + \mathbf{w}_{(\mathbf{w} = \mathbf{d} - \mathbf{L}_{\mathbf{ob}})}$$

数学モデルが非線形の場合⑤

後は、線形の場合の式を適用すれば良い。
行列形では、最小二乗計算は公式で表せる。

観測方程式 $\mathbf{v} = \mathbf{A} \cdot \Delta\mathbf{x} + \mathbf{w}_{(\mathbf{w} = \mathbf{d} - \mathbf{L}_{ob})}$

最小二乗解 $\Delta\hat{\mathbf{x}} = -(\mathbf{A}^{T}\mathbf{P}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^{T}\mathbf{P}\mathbf{w},\ \mathbf{x} = \mathbf{x}^{0} + \Delta\mathbf{x}$

数学モデルが非線形の場合⑥

まとめ

数学モデル $\mathbf{L} = f(\mathbf{x})$

統計モデル $\Sigma_{\mathbf{L_{ob}}} \quad \mathbf{P} = \sigma_0^2 \Sigma_{\mathbf{L}_{ob}}^{-1}$

観測方程式 $\mathbf{v} = \mathbf{A} \cdot \Delta\mathbf{x} + \mathbf{w}$

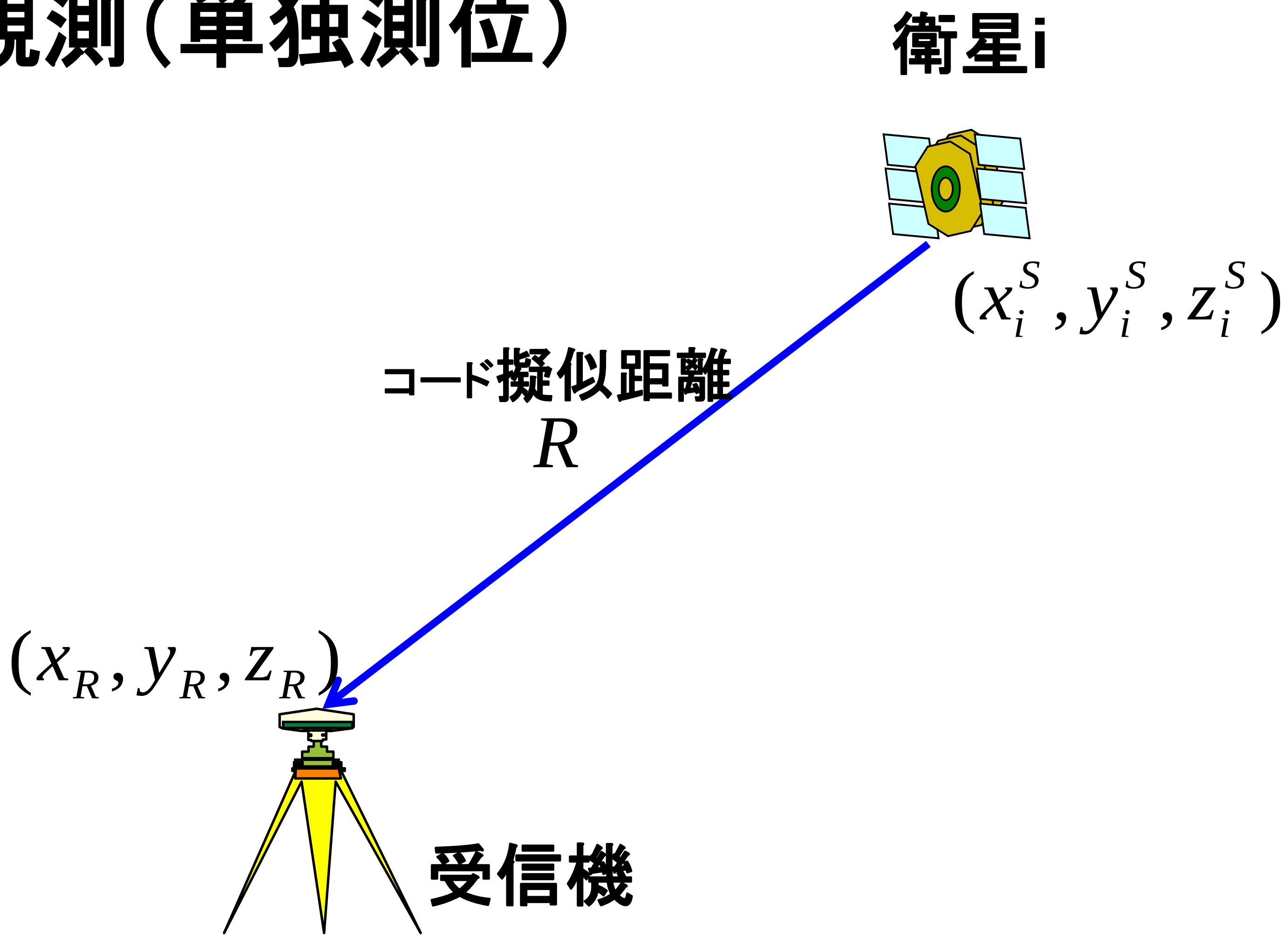
$$\mathbf{x} = \mathbf{x_0} + \Delta\mathbf{x}, \qquad \mathbf{L} = \mathbf{L_{ob}} + \mathbf{v}$$

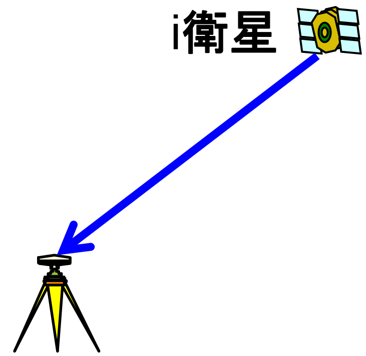
$$\mathbf{A} = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}\bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x_0}}, \qquad \mathbf{w} = \mathbf{d} - \mathbf{L}_{ob}$$

最小二乗解 $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x}^0 - (\mathbf{A}^T\mathbf{P}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{P}\mathbf{w}$

非線形数学モデルの例

GPS観測（単独測位）



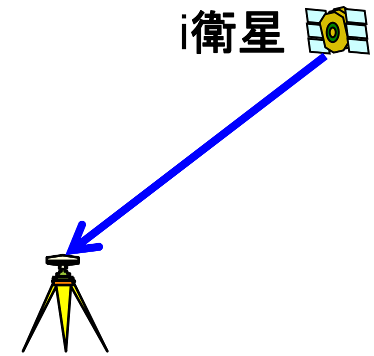


GPSの単独測位観測の場合、未知量を受信機座標 x_R, y_R, z_R と受信機時計誤差 δ_R とすれば、数学モデルは、コード観測値 R_i を使って

$$
\begin{aligned}
R_i &= f(x_R, y_R, z_R, \delta_R) \\
&= \sqrt{(x_i^{\,S} - x_R)^2 + (y_i^{\,S} - y_R)^2 + (z_i^{\,S} - z_R)^2} + c(\delta_R - \delta_i^{\,S})
\end{aligned}
$$

で表される。 ここで δ_i^S は、衛星時計誤差。

単独測位の観測方程式



未知量＝概略値＋補正量

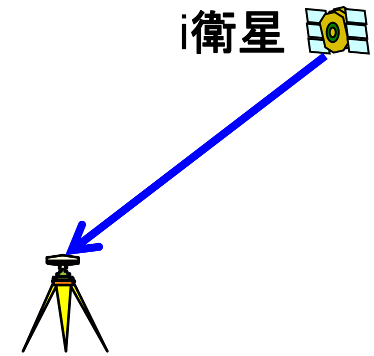
$$x_R = x_R^0 + \delta\, x_R$$
$$y_R = y_R^0 + \delta\, y_R$$
$$z_R = z_R^0 + \delta\, z_R$$
$$\delta_R = \delta_R$$

観測量＝観測値＋残差

$$R_i = R_i^{ob} + v_i$$

モデルを線形に近似するためテイラー展開を行う。

$$R_i = R_i^{ob} + v_i = f(x_R, y_R, z_R, \delta_R)$$
$$\cong f(x_R^0, y_R^0, z_R^0, \delta_R) + \left.\frac{\partial f}{\partial x_R}\right|_0 \Delta x_R + \left.\frac{\partial f}{\partial y_R}\right|_0 \Delta y_R + \left.\frac{\partial f}{\partial x_R}\right|_0 \Delta z_R$$



単独測位の観測方程式

各微分係数を計算すると、i衛星に対する観測方程式は

$$v_i = a_i \cdot \delta x_R + b_i \cdot \delta y_R + c_i \cdot \delta z_R + c \cdot \delta_R + l_i$$

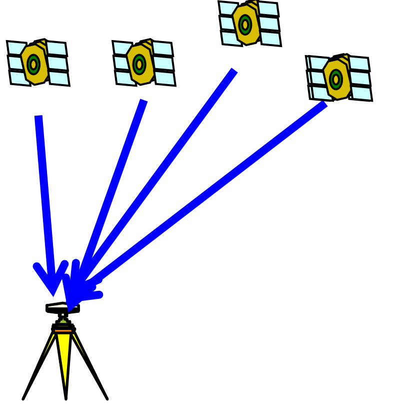
ただし

$$a_i = \frac{x_i^S - x_R^0}{\rho_i^0}, b_i = \frac{y_i^S - y_R^0}{\rho_i^0}, c_i = \frac{z_i^S - z_R^0}{\rho_i^0}$$

$$\rho_i^0 = \sqrt{(x_i^S - x_R^0)^2 + (y_i^S - y_R^0)^2 + (z_i^S - z_R^0)^2}$$

$$l_i = \rho_i^0 - R_i^{ob} - c\delta_i^S$$

単独測位の観測方程式



n個の衛星を観測したとするとその観測方程式は

$$v_1 = a_1 \cdot \delta x_R + b_1 \cdot \delta y_R + c_1 \cdot \delta z_R + c \cdot \delta_R + l_1$$

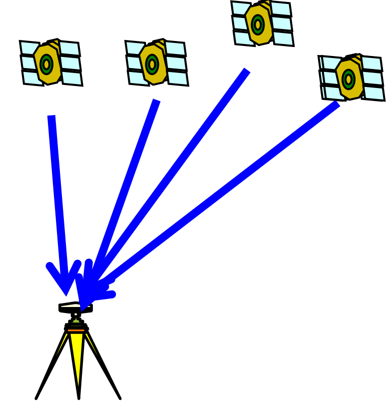
$$v_2 = a_2 \cdot \delta x_R + b_2 \cdot \delta y_R + c_2 \cdot \delta z_R + c \cdot \delta_R + l_2$$

$$\vdots \quad = \quad \vdots \qquad\qquad \vdots \qquad\qquad\qquad \vdots$$

$$v_n = a_n \cdot \delta x_R + b_n \cdot \delta y_R + c_n \cdot \delta z_R + c \cdot \delta_R + l_n$$

となる。

単独測位の観測方程式



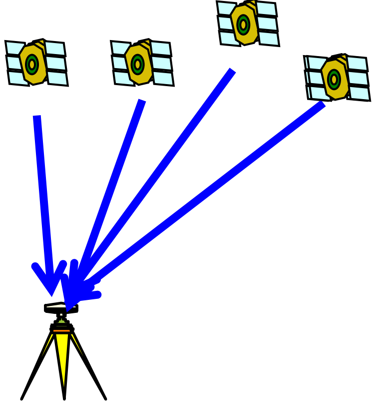
これを行列で表すと

$$\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & c_1 & c \\ a_2 & b_2 & c_2 & c \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_n & b_n & c_n & c \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \delta x_R \\ \delta y_R \\ \delta z_R \\ \delta_R \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} l_1 \\ l_2 \\ \vdots \\ l_n \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\Delta}\mathbf{x} + \mathbf{W}$$

となる。

単独測位の最小二乗計算



$$\mathbf{v} = \mathbf{A} \cdot \Delta\mathbf{x} + \mathbf{w}$$

観測方程式がこのように行列の形に求まれば、
あとは最小二乗の公式から解は以下のようになる。

最小二乗解

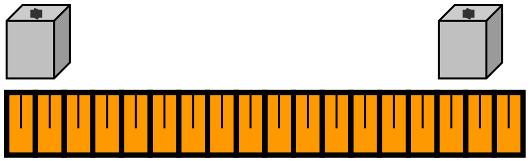
$$\Delta\hat{\mathbf{x}} = -(\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{w},$$

$$\mathbf{x} = (x_R, y_R, z_R, \delta_R)^{\mathrm{T}} = \mathbf{x}^0 + \Delta\mathbf{x}$$

３、最小二乗解の精度

最小二乗計算では、解は観測値の一次式で表される。

距離観測の例



$$\hat{x} = \frac{\sum_{i=1}^{n} p_i l_i}{\sum_{i=1}^{n} p_i}$$

従って、観測値に誤差が含まれていれば、その誤差は解に影響を与える。 観測値の誤差が大きければ、結果として解の精度も悪くなるであろう。 観測値の誤差（精度）は観測の分散（あるいは標準偏差）で与えられる。 解の精度は、解の分散（あるいは標準偏差）を計算すれば分かる。
観測値の精度が解の精度にどのように影響するかを計算する式は、誤差伝搬式で計算できる。

最初に誤差伝搬式の導出を見てみよう。

誤差の伝播

観測値　l_1, l_2　の分散　σ_1^2, σ_2^2　が分っている時、

その一次式　$x = a_1 l_1 + a_2 l_2 + a_3$（$a_1, a_2, a_3$は定数）

の分散　σ_x^2 は次のようになる。

$$\boxed{\sigma_x^2 = a_1^2 \sigma_1^2 + a_2^2 \sigma_2^2 + 2 a_1 a_2 \sigma_{12}}$$

（ただしここで σ_{12} は観測の共分散）

証明

$$x = a_1 l_1 + a_2 l_2 + a_3 \qquad \mu_x = a_1\mu_1 + a_2\mu_2 + a_3$$

$$\begin{aligned}
\sigma_x^2 &= \sum p(x-\mu_x)^2 \\
&= \sum p(a_1 l_1 + a_2 l_2 + a_3 - a_1\mu_1 - a_2\mu_2 - a_3)^2 \\
&= \sum p\{a_1(l_1-\mu_1) + a_2(l_2-\mu_2)\}^2 \\
&= a_1^2 \sum p(l_1-\mu_1)^2 + a_2^2 \sum p(l_2-\mu_2)^2 \\
&\quad + 2a_1a_2 \sum p(l_1-\mu_1)(l_2-\mu_2) \\
&= a_1^2\sigma_1^2 + a_2^2\sigma_2^2 + 2a_1a_2\sigma_{12}
\end{aligned}$$

誤差の伝播:　　行列による表現

このように行列で表せば、一般的な誤差伝搬式として使える。

$$x = a_1 l_1 + a_2 l_2 + a_3$$

$$= \begin{bmatrix} a_1 & a_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_1 \\ l_2 \end{bmatrix} + a_3$$

$$\sigma_x^2 = a_1^2 \sigma_1^2 + a_2^2 \sigma_2^2 + 2 a_1 a_2 \sigma_{12}$$

$$= \begin{bmatrix} a_1 & a_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12} \\ \sigma_{12} & \sigma_2^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{L} + \mathbf{a}$$

$$\sigma_x^2 = \mathbf{A} \sum\nolimits_{\mathbf{L}} \mathbf{A}^{\mathbf{T}}$$

最小二乗解の精度

前節で求めた誤差伝搬式を使って、
最小二乗解の精度を計算する。

最小二乗解の精度

第２章で見たように、数学モデルが一般的な非線形 $\mathbf{L}=f(\mathbf{x})$ の場合、最小二乗解は

$$\hat{\mathbf{x}}=\mathbf{x_0}-(\mathbf{A}^T\mathbf{PA})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{Pw}$$

と表せる。

ただし

$$\mathbf{P}=\begin{bmatrix} p_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & p_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_n \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}=\frac{\partial\mathbf{f}}{\partial\mathbf{x}}$$

$$\mathbf{w}=\mathbf{f}(\mathbf{x_0})-\mathbf{L_{ob}}$$

最小二乗解の精度

誤差伝搬式（ $\mathbf{L}$ の分散が $\mathbf{x}$ の分散に与える影響）

$$\mathbf{x} = \mathbf{AL} + \mathbf{B} \Rightarrow \sum\nolimits_{\mathbf{x}} = \mathbf{A} \sum\nolimits_{\mathbf{L}} \mathbf{A}^{\mathrm{T}}$$

をこの最小二乗解 $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x_0} - (\mathbf{A}^T\mathbf{PA})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{Pw}$

に適用する。

最小二乗解の精度

解を定数部分と観測値を含む部分に分けると

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x}^{\mathbf{0}} - (\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}(d - L_{ob})$$

$$= \left\{ \mathbf{x}^{\mathbf{0}} - (\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A})\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{d} \right\} + (\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A})\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{L}_{ob}$$

となるから、これに誤差伝搬式を適用すると
解の分散は次のように表せる。

$$\sum\nolimits_{\hat{\mathbf{x}}} = \left((\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P} \right) \cdot \sum\nolimits_{\mathbf{L}} \cdot \left((\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P} \right)^{\mathbf{T}}$$

最小二乗解の精度

$$\Sigma_{\hat{\mathbf{x}}} = \left((\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P} \right) \Sigma_{\mathbf{L}} \left((\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P} \right)^{\mathrm{T}}$$

これを整理し、

$$\Sigma_{\mathbf{L}} = \sigma_0^2 \mathbf{P}^{-1} 、 \left((\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P} \right)^{T} = \mathbf{P}\mathbf{A}(\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A})^{-1}$$

であることを考慮すると、結局解の精度は

$$\boxed{\Sigma_{\hat{\mathbf{x}}} = \sigma_0^2 (\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A})^{-1} = (\mathbf{A}^{\mathrm{T}} \Sigma_{\mathbf{L}}^{-1} \mathbf{A})^{-1}}$$

と表せる。

最小二乗解の精度（まとめ）

①各観測値の分散 Σ_L （絶対精度）が分かっている場合

解の精度は

$$\boxed{\Sigma_{\hat{x}} = (A^T \Sigma_L^{-1} A)^{-1}}$$

で計算できる。

②各観測値の重み　P　（相対精度）だけが分かっている場合

解の精度は

$$\sum_{\hat{\mathbf{x}}} = \sigma_0^2 (\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A})^{-1}$$

となり、基準分散の値　σ_0^2　が必要。 この基準分散の値は次式で計算できることが知られている。（証明は「観測と最小二乗法」に）

$$\hat{\sigma}_0^2 = \frac{\hat{\mathbf{v}}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\hat{\mathbf{v}}}{n-u}$$

ただし　$\hat{\mathbf{v}} = \mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{x}} + \mathbf{w}$

結局解の精度（分散）は、

$$\sum_{\hat{\mathbf{x}}} = \frac{\hat{\mathbf{v}}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\hat{\mathbf{v}}}{n-u} (\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A})^{-1}$$

となる。

4、最小二乗法の検定

最小二乗法の評価

最小二乗計算の過程で、観測値に通常考えられない異常値が含まれていたとか、あるいは最小二乗計算の過程で何らかの問題があった（不十分な数学モデルや計算ミス等）場合、そのチェックが必要になる。ある特別な指標をチェックすることで、全体として最小二乗計算が適切に行われたかどうかの評価が行える方法がある。　カイ二乗検定である。

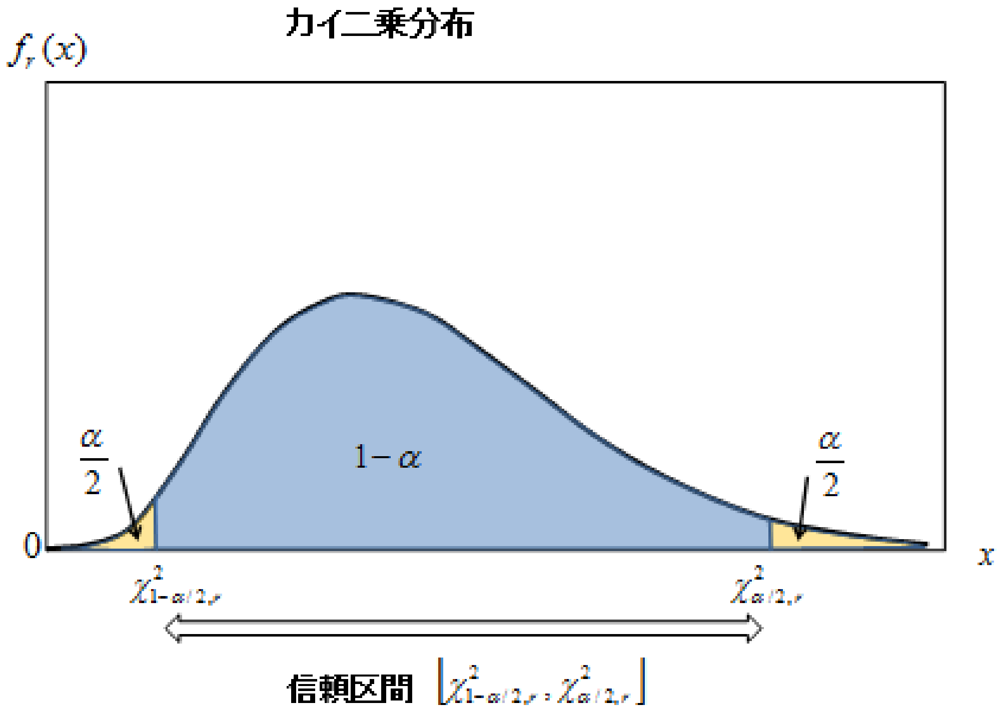
カイ二乗検定

詳しくは、「観測と最小二乗法」を参照していただくとしてここではポイントだけ説明する。

１、「残差二乗和の推定値と基準分散の比：$\frac{\hat{\mathbf{v}}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\hat{\mathbf{v}}}{\sigma_0^2}$
 は、自由度 r のカイ二乗分布に従う」
２、従って最小二乗計算に問題がなければ、 $\frac{\hat{\mathbf{v}}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\hat{\mathbf{v}}}{\sigma_0^2}$
 はカイ二乗分布の95%の信頼区間に収まり、次式が成り立つ。

$$\chi^2_{0.975,r} \leq \frac{\hat{\mathbf{v}}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\hat{\mathbf{v}}}{\sigma_0^2} \leq \chi^2_{0.025,r}$$

カイ二乗分布の信頼区間



αを0.05にすれば有意水準95%の信頼区間になる

カイ二乗検定

最小二乗計算が終わった後、 $\dfrac{\hat{\mathbf{v}}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\hat{\mathbf{v}}}{\sigma_0^2}$ を計算し、これが

$$\chi^2_{0.975,r} \le \frac{\hat{\mathbf{v}}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\hat{\mathbf{v}}}{\sigma_0^2} \le \chi^2_{0.025,r}$$

が成り立つかどうかをチェックする。これがカイ二乗検定である。 これにより全体として最小二乗計算が妥当なものであったかどうかが判定できる。

５、最小二乗計算の実際

最小二乗法の手順

①(　数学モデル　)　$\mathbf{L} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{d}$

観測量と　未知量との関係

②(統計モデル)　$\mathbf{P} = \sigma_0^2 \sum_{L_{ob}}^{-1}$

観測がどの程度の精度　で行われたかを示すもの

③(最小二乗の原理)　$V^T PV = \min$

④(観測方程式)　$\mathbf{v} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{w}$　$(\mathbf{w} = \mathbf{d} - \mathbf{L}_{ob})$

⑤(　正規方程式)　$(\mathbf{A}^T \mathbf{P} \mathbf{A})\hat{\mathbf{x}} + \mathbf{A}^T \mathbf{P} \mathbf{w} = \mathbf{0}$

⑤(　最小二乗解)　$\hat{\mathbf{x}} = -(\mathbf{A}^T \mathbf{P} \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{P} \mathbf{w}$

最小二乗計算の実際

観測方程式　$\mathbf{v} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{w}$　が与えられれば

最小二乗解は　$\hat{\mathbf{x}} = -(\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{w}$

$$\sum_{\hat{\mathbf{x}}} = \sigma_0^2 (\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}\mathbf{A})^{-1}$$

で求まる。

すなわち最小二乗計算は、観測方程式の形が決まれば、解は自動的に決まるといってよい。その意味で観測方程式の構築が非常に重要。

観測方程式の作り方

１）観測方程式は、観測量と未知量との関係を線形化したもの

２）観測方程式は、観測の種類ごとにある程度パターン化
できる。

３）観測方程式は、観測を行うたびにひとつづつ作られる

４）個々の観測方程式をまとめて行列の形にすれば
全体の観測方程式ができる

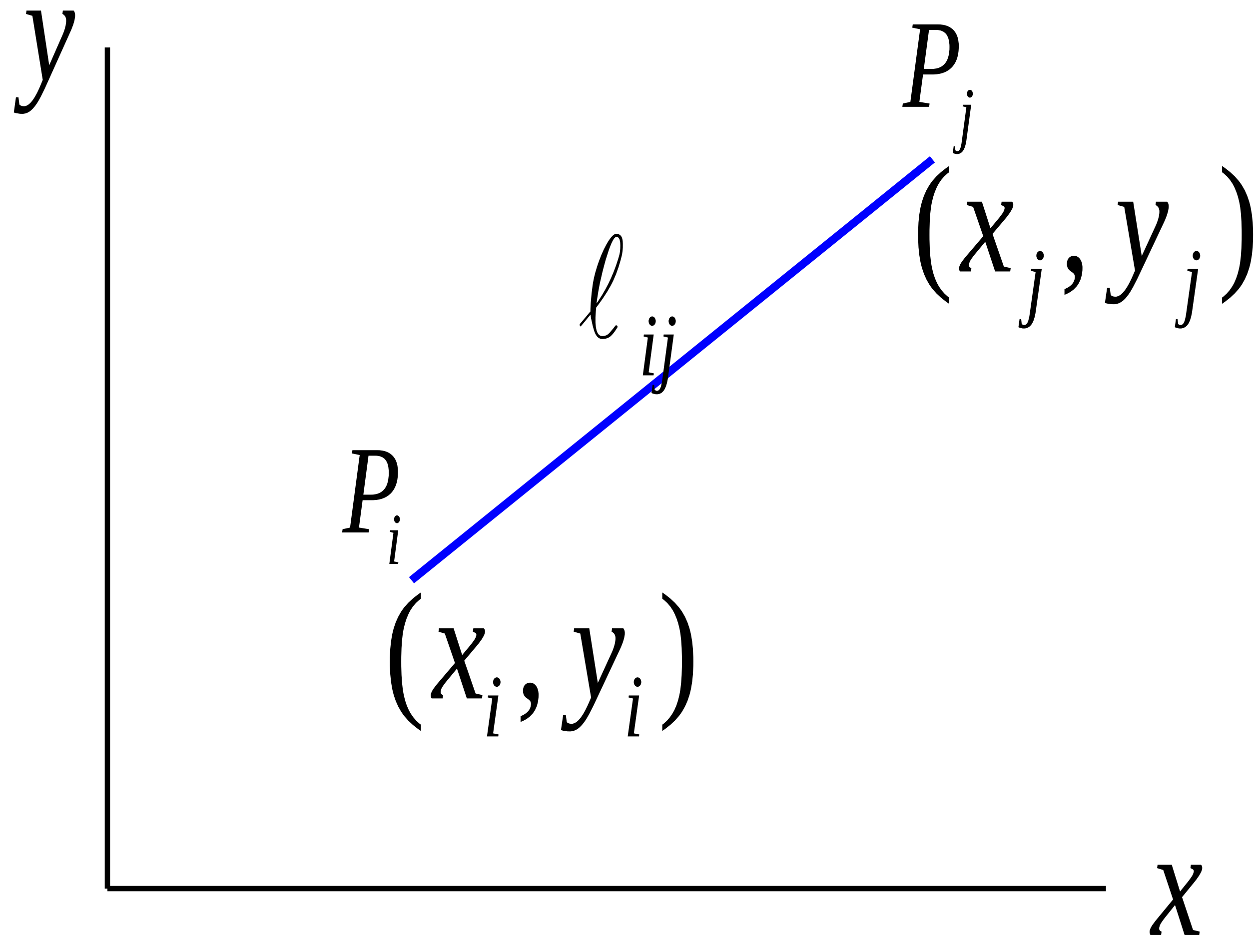
パターン化された観測方程式

ここでは測量でよく使われる観測方程式の例を見てみよう。

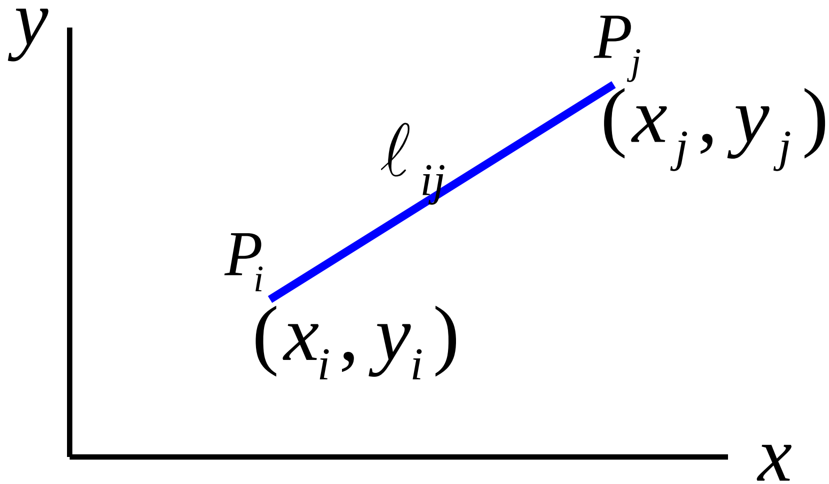
- 距離観測
- 方位角観測
- 角観測

距離観測

距離観測



距離観測の観測方程式

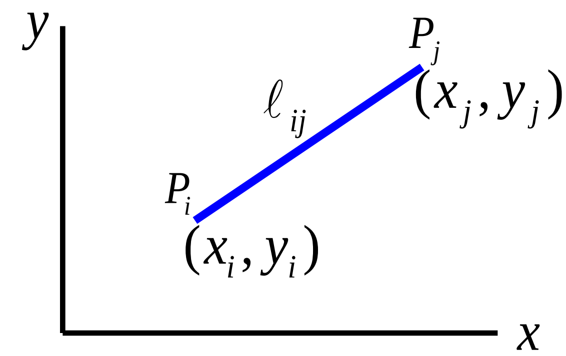


平面上の2点を結ぶ距離観測の場合、未知量を平面座標　x_i, y_i, x_j, y_j　とすれば、数学モデルは

$$\ell_{ij} = f(x_i, y_i, x_j, y_j) = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2}$$

で表される。

距離観測の観測方程式



未知量＝概略値＋補正量

$$x_i = x_i^0 + \Delta x_i \qquad x_j = x_j^0 + \Delta x_j$$

$$y_i = y_i^0 + \Delta y_i \qquad y_j = y_j^0 + \Delta y_j$$

観測量＝観測値＋残差

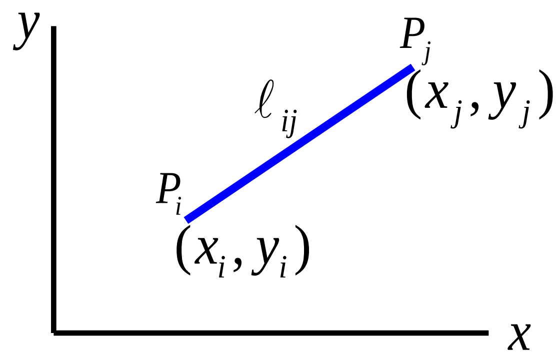
$$\ell_{ij} = \ell_{ij}^{ob} + v_{ij}$$

モデルを線形化するためテイラー展開する。

$$\ell_{ij} = \ell_{ij}^{ob} + v_{ij} = f(x_i, y_i, x_j, y_j)$$

$$\cong f(x_i^0, y_i^0, x_j^0, y_j^0) + \left.\frac{\partial f}{\partial x_i}\right|_0 \Delta x_i + \left.\frac{\partial f}{\partial y_i}\right|_0 \Delta y_i + \left.\frac{\partial f}{\partial x_j}\right|_0 \Delta x_j + \left.\frac{\partial f}{\partial y_j}\right|_0 \Delta y_j$$

距離観測の観測方程式



各微分係数を計算すると観測方程式は

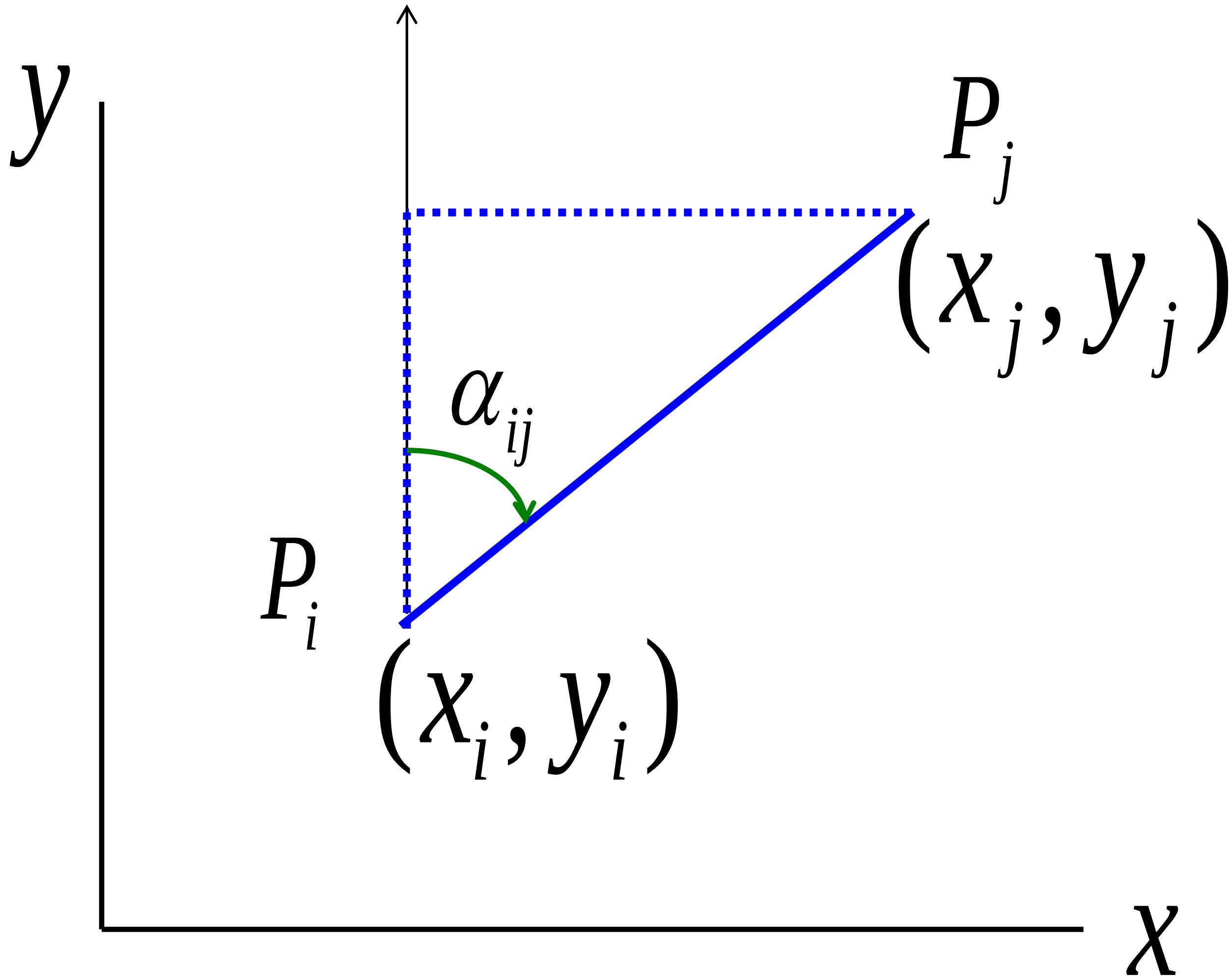
$$v_{ij} = \frac{x_i^0 - x_j^0}{\ell_{ij}^0}\Delta x_i + \frac{y_i^0 - y_j^0}{\ell_{ij}^0}\Delta y_i - \frac{x_i^0 - x_j^0}{\ell_{ij}^0}\Delta x_j - \frac{y_i^0 - y_j^0}{\ell_{ij}^0}\Delta y_j + \ell_{ij}^0 - \ell_{ij}^{ob}$$

ただし $\ell_{ij}^0 = \sqrt{(x_i^0 - y_i^0)^2 + (x_j^0 - y_j^0)^2}$

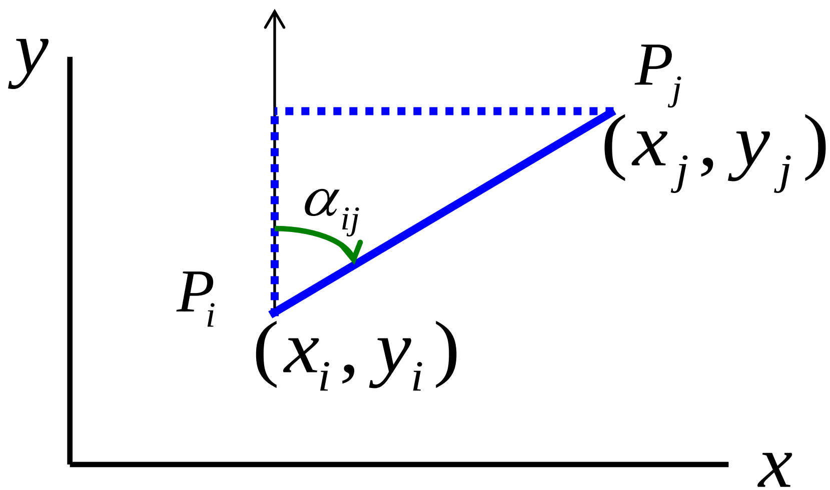
方位角観測

（方位角観測とは、北の方角からの角度を測定することである。）

方位角観測



方位角観測の観測方程式

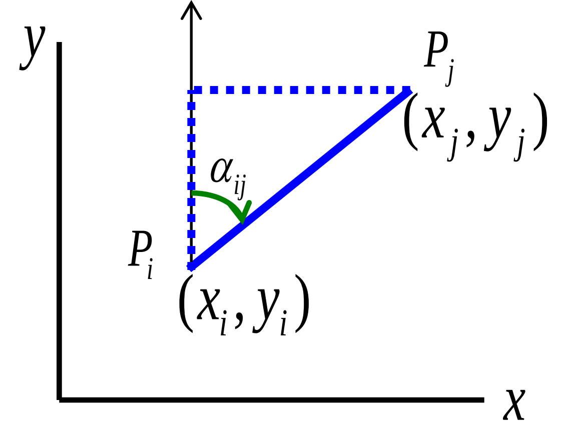


P_i から P_j への方位角観測の場合、未知量を平面座標　x_i, y_i, x_j, y_j　とすれば、数学モデルは

$$\alpha_{ij} = f(x_i, y_i, x_j, y_j) = \tan^{-1} \frac{x_j - x_i}{y_j - y_i}$$

で表される。

方位角観測の観測方程式



未知量＝概略値＋補正量

$$x_i = x_i^0 + \Delta x_i \quad x_j = x_j^0 + \Delta x_j$$

$$y_i = y_i^0 + \Delta y_i \quad y_j = y_j^0 + \Delta y_j$$

観測量＝観測値＋残差

$$\alpha_{ij} = \alpha_{ij}^{ob} + v_{ij}$$

テイラー展開

$$\alpha_{ij} = \alpha_{ij}^{ob} + v_{ij} = f(x_i, y_i, x_j, y_j)$$

$$\cong f(x_i^0, y_i^0, x_j^0, y_j^0) + \left.\frac{\partial f}{\partial x_i}\right|_0 \Delta x_i + \left.\frac{\partial f}{\partial y_i}\right|_0 \Delta y_i + \left.\frac{\partial f}{\partial x_j}\right|_0 \Delta x_j + \left.\frac{\partial f}{\partial y_j}\right|_0 \Delta y_j$$

$\tan^{-1}$の微分式

$$(\tan^{-1} u)' = \frac{1}{1+u^2}$$

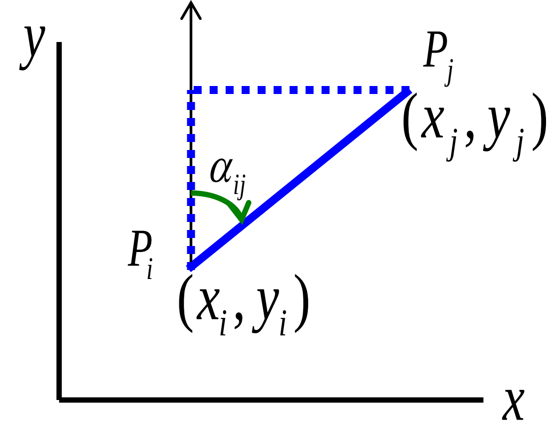
$$\frac{\partial}{\partial x}\tan^{-1} u = \frac{1}{1+u^2}\frac{\partial u}{\partial x}$$

$$u = \frac{x_j - x_i}{y_j - y_i}$$

$$\frac{\partial}{x_i}\tan^{-1}\frac{x_j - x_i}{y_j - y_i} = \frac{1}{1+\left[(x_j - x_i)/(y_j - y_i)\right]^2}\cdot\frac{-1}{y_j - y_i}$$

$$= -\frac{y_j - y_i}{(x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2}$$

方位角観測の観測方程式



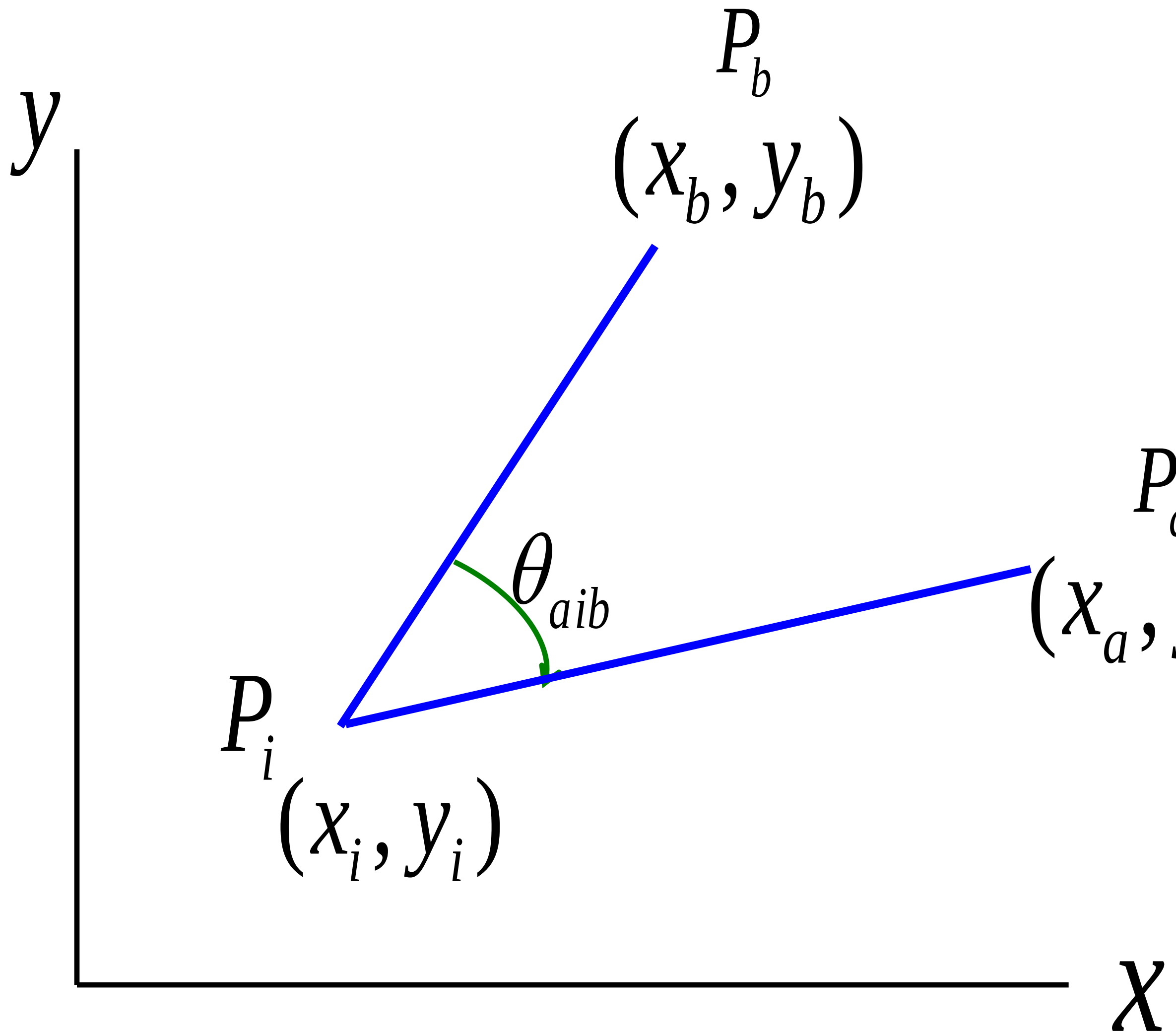
各微分係数を計算すると観測方程式は

$$v_{ij} = -\frac{y_j^0 - y_i^0}{(\ell_{ij}^0)^2}\Delta x_i + \frac{x_j^0 - x_i^0}{(\ell_{ij}^0)^2}\Delta y_i + \frac{y_j^0 - y_i^0}{(\ell_{ij}^0)^2}\Delta x_j - \frac{x_j^0 - x_i^0}{(\ell_{ij}^0)^2}\Delta y_j + \alpha_{ij}^0 - \alpha_{ij}^{ob}$$

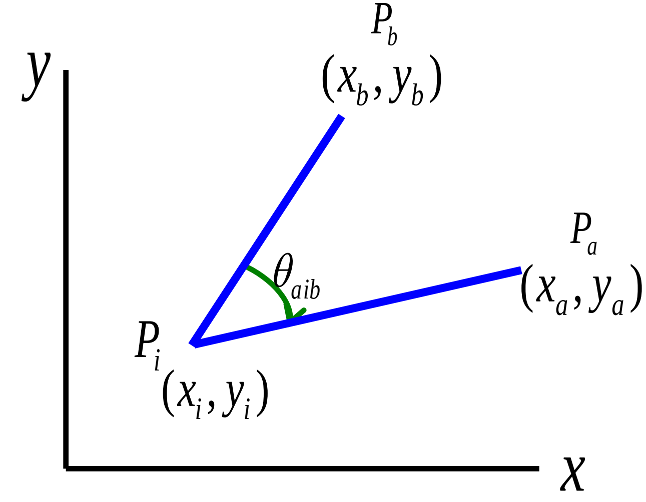
ただし $\ell_{ij}^0 = \sqrt{(x_i^0 - y_i^0)^2 + (x_j^0 - y_j^0)^2}$ $\qquad \alpha_{ij}^0 = \tan^{-1}\frac{x_j^0 - x_i^0}{y_j^0 - y_i^0}$

角観測

角観測は、２つの方位角観測の差と考えることができる。



角観測の観測方程式



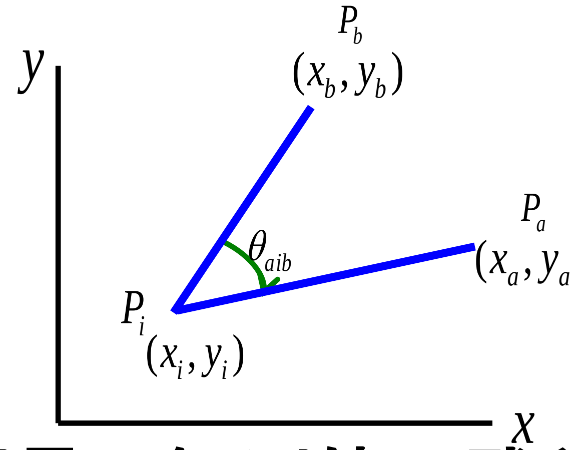
P_i から P_a 　 P_b 　への角観測の場合、未知量を平面座標 　$x_i, y_i, x_a, y_a, x_b, y_b$ 　とすれば、数学モデルは

$$\theta_{aib} = f(x_i, y_i, x_a, y_a, x_b, y_b)$$

$$= \tan^{-1}\frac{x_a - x_i}{y_a - y_i} - \tan^{-1}\frac{x_b - x_i}{y_b - y_i}$$

で表される。

角観測の観測方程式



未知量＝概略値＋補正量

$$x_i = x_i^0 + \Delta x_i \quad x_a = x_a^0 + \Delta x_a \quad x_b = x_b^0 + \Delta x_b$$

$$y_i = y_i^0 + \Delta y_i \quad y_a = y_a^0 + \Delta y_a \quad y_b = y_b^0 + \Delta y_b$$

観測量＝観測値＋残差

$$\theta_{aib} = \theta_{aib}^{ob} + v_{aib}$$

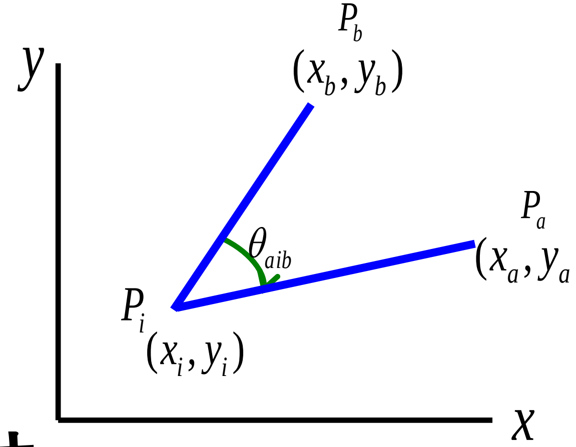
テイラー展開

$$\theta_{aib} = \theta_{aib}^{ob} + \theta_{aib} = f(x_i, y_i, x_a, y_a, x_b, y_b)$$

$$\cong f(x_i^0, y_i^0, x_a^0, y_a^0, x_b^0, y_b^0)$$

$$+ \left.\frac{\partial f}{\partial x_i}\right|_0 \Delta x_i + \left.\frac{\partial f}{\partial y_i}\right|_0 \Delta y_i + \left.\frac{\partial f}{\partial x_a}\right|_0 \Delta x_a + \left.\frac{\partial f}{\partial y_a}\right|_0 \Delta y_a + \left.\frac{\partial f}{\partial x_b}\right|_0 \Delta x_b + \left.\frac{\partial f}{\partial y_b}\right|_0 \Delta y_b$$

角観測の観測方程式



各微分係数を計算すると観測方程式は

$$v_{aib} = \left(\frac{y_b^0 - y_i^0}{(\ell_{ib}^0)^2} - \frac{y_a^0 - y_i^0}{(\ell_{ia}^0)^2} \right) \Delta x_i + \left(\frac{x_a^0 - x_i^0}{(\ell_{ia}^0)^2} - \frac{x_b^0 - x_i^0}{(\ell_{ib}^0)^2} \right) \Delta y_i$$

$$+ \frac{y_a^0 - y_i^0}{(\ell_{ia}^0)^2} \Delta x_a - \frac{x_a^0 - x_i^0}{(\ell_{ia}^0)^2} \Delta y_a - \frac{y_b^0 - y_i^0}{(\ell_{ib}^0)^2} \Delta x_b + \frac{x_b^0 - x_i^0}{(\ell_{ib}^0)^2} \Delta y_b + \theta_{aib}^0 - \theta_{aib}^{ob}$$

ただし

$$\ell_{ia}^0 = \sqrt{(x_a^0 - x_i^0)^2 + (y_a^0 - y_i^0)^2}$$

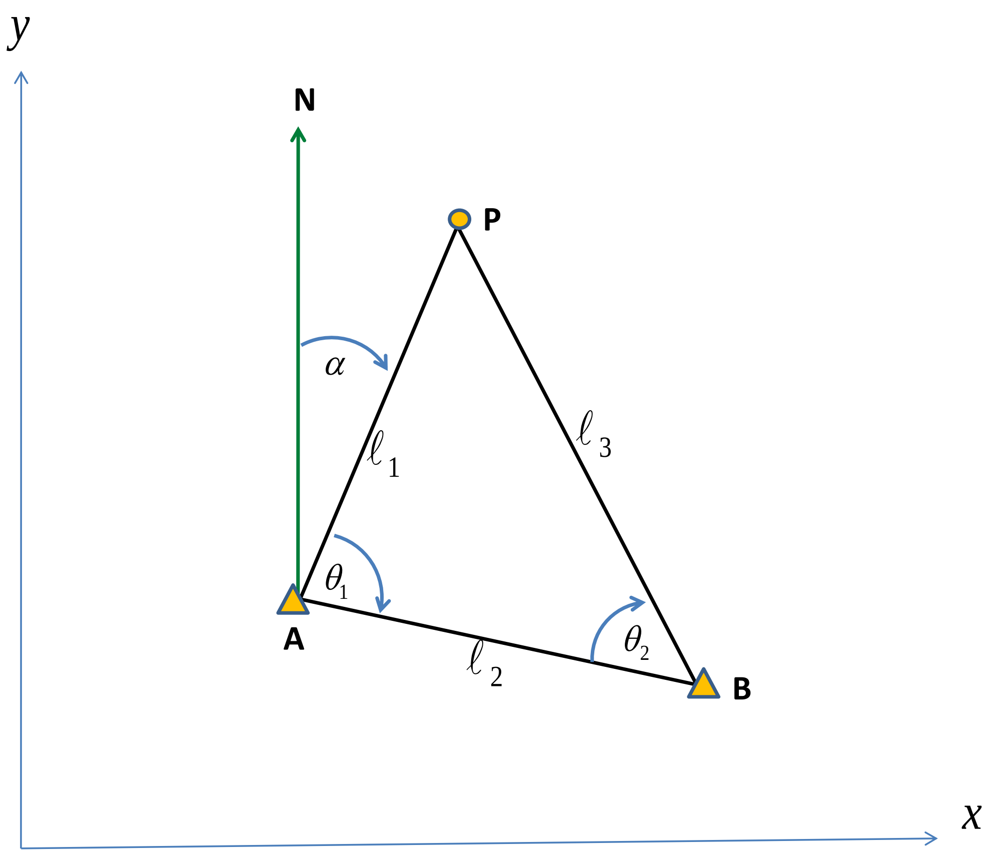
$$\ell_{ib}^0 = \sqrt{(x_b^0 - x_i^0)^2 + (y_b^0 - y_i^0)^2}$$

$$\theta_{aib}^0 = \tan^{-1} \frac{x_a^0 - x_i^0}{y_a^0 - y_i^0} - \tan^{-1} \frac{x_b^0 - x_i^0}{y_b^0 - y_i^0}$$

最小二乗法の計算例
（簡単な基準点測量）

最小二乗法の計算例 （基準点測量）

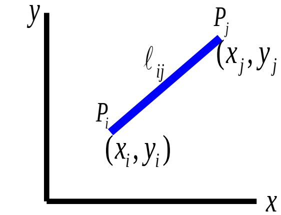
基準点A,Bと未知点Pからなる簡単な2次元の測量を考える。
今図のような距離観測と角観測、方位角観測を行った場合、
未知点Pの位置座標を最小二乗法で求めてみよう。



最小二乗法の計算例（基準点測量）

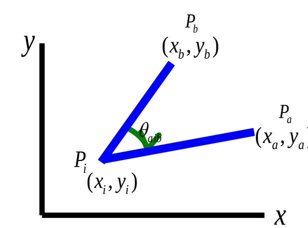
利用する観測方程式

距離観測



$$v_{ij} = \frac{x_i^0 - x_j^0}{\ell_{ij}^0}\Delta x_i + \frac{y_i^0 - y_j^0}{\ell_{ij}^0}\Delta y_i - \frac{x_i^0 - x_j^0}{\ell_{ij}^0}\Delta x_j - \frac{y_i^0 - y_j^0}{\ell_{ij}^0}\Delta y_j + \ell_{ij}^0 - \ell_{ij}^{ob}$$

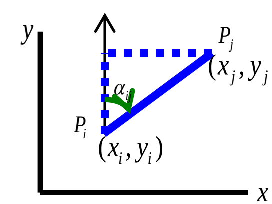
角観測



$$v_{aib} = \left(\frac{y_b^0 - y_i^0}{(\ell_{ib}^0)^2} - \frac{y_a^0 - y_i^0}{(\ell_{ia}^0)^2}\right)\Delta x_i + \left(\frac{x_a^0 - x_i^0}{(\ell_{ia}^0)^2} - \frac{x_b^0 - x_i^0}{(\ell_{ib}^0)^2}\right)\Delta y_i$$

$$+ \frac{y_a^0 - y_i^0}{(\ell_{ia}^0)^2}\Delta x_a - \frac{x_a^0 - x_i^0}{(\ell_{ia}^0)^2}\Delta y_a - \frac{y_b^0 - y_i^0}{(\ell_{ib}^0)^2}\Delta x_b + \frac{x_b^0 - x_i^0}{(\ell_{ib}^0)^2}\Delta y_b + \theta_{aib}^0 - \theta_{aib}^{ob}$$

方位角観測



$$v_{ij} = -\frac{y_j^0 - y_i^0}{(\ell_{ij}^0)^2}\Delta x_i + \frac{x_j^0 - x_i^0}{(\ell_{ij}^0)^2}\Delta y_i + \frac{y_j^0 - y_i^0}{(\ell_{ij}^0)^2}\Delta x_j - \frac{x_j^0 - x_i^0}{(\ell_{ij}^0)^2}\Delta y_j + \alpha_{ij}^0 - \alpha_{ij}^{ob}$$

最小二乗法の計算例（基準点測量）

観測方程式の作成
例えば、AP間の距離観測方程式は、公式

$$v_{ij} = \frac{x_i^0 - x_j^0}{\ell_{ij}^0}\Delta x_i + \frac{y_i^0 - y_j^0}{\ell_{ij}^0}\Delta y_i - \frac{x_i^0 - x_j^0}{\ell_{ij}^0}\Delta x_j - \frac{y_i^0 - y_j^0}{\ell_{ij}^0}\Delta y_j + \ell_{ij}^0 - \ell_{ij}^{ob}$$

で、

$$P_i \to A \quad ,P_j \to P \qquad (x_i^0, y_i^0) \to (x_A, y_A) \qquad (\Delta x_j, \Delta y_j) \to (\Delta x, \Delta y)$$

$$(x_j^0, y_j^0) \to (x^0, y^0) \qquad (\Delta x_i, \Delta y_i) = (0,0)$$

と対応させれば良い。 するとこの観測方程式は

$$v_{\ell 1} = \frac{x^0 - x_A}{\ell_1^0}\Delta x + \frac{y^0 - y_A}{\ell_1^0}\Delta y + \ell_1^0 - \ell_1^{ob}$$

となることが分かるであろう。

最小二乗法の計算例（基準点測量）

観測方程式の作成

同様にして他の観測方程式も作ると、

$$v_{\ell 1} = \frac{x^0 - x_A}{\ell_1^0}\Delta x + \frac{y^0 - y_A}{\ell_1^0}\Delta y + \ell_1^0 - \ell_1^{ob}$$

$$v_{\ell 2} = \ell_2^0 - \ell_2^{ob}$$

$$v_{\ell 3} = \frac{x^0 - x_B}{\ell_3^0}\Delta x + \frac{y^0 - y_B}{\ell_3^0}\Delta y + \ell_3^0 - \ell_3^{ob}$$

$$v_{\theta 1} = -\frac{y^0 - y_A}{(\ell_1^0)^2}\Delta x + \frac{x^0 - x_A}{(\ell_1^0)^2}\Delta y + \theta_1^0 - \theta_1^{ob}$$

$$v_{\theta 2} = \frac{y^0 - y_B}{(\ell_3^0)^2}\Delta x - \frac{x^0 - x_B}{(\ell_3^0)^2}\Delta y + \theta_2^0 - \theta_2^{ob}$$

$$v_{\alpha} = \frac{y^0 - y_A}{(\ell_1^0)^2}\Delta x - \frac{x^0 - x_A}{(\ell_1^0)^2}\Delta y + \alpha^0 - \alpha^{ob}$$

最小二乗法の計算例（基準点測量）

観測方程式の作成

行列の形にまとめると（角度がラジアン単位の場合はそのまま使える）

$$
\begin{bmatrix} v_{\ell 1} \\ v_{\ell 2} \\ v_{\ell 3} \\ v_{\theta 1} \\ v_{\theta 2} \\ v_{\alpha} \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
\dfrac{x^0 - x_A}{\ell_1^0} & \dfrac{y^0 - y_A}{\ell_1^0} \\
0 & 0 \\
\dfrac{x^0 - x_B}{\ell_3^0} & \dfrac{y^0 - y_B}{\ell_3^0} \\
-\dfrac{y^0 - y_A}{(\ell_1^0)^2} & \dfrac{x^0 - x_A}{(\ell_1^2)^2} \\
\dfrac{y^0 - y_B}{(\ell_3^0)^2} & -\dfrac{x^0 - x_B}{(\ell_3^0)^2} \\
\dfrac{y^0 - y_A}{(\ell_1^0)^2} & -\dfrac{x^0 - x_A}{(\ell_1^0)^2}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{bmatrix}
+
\begin{bmatrix} \ell_1^0 - \ell_1^{ob} \\ \ell_2^0 - \ell_2^{ob} \\ \ell_3^0 - \ell_3^{ob} \\ \theta_1^0 - \theta_1^{ob} \\ \theta_2^0 - \theta_2^{ob} \\ \alpha^0 - \alpha^{ob} \end{bmatrix}
$$

最小二乗法の計算例（基準点測量）

観測方程式の作成

（角度が秒単位の場合、$\rho'' = 180 \times 3600 / \pi = 206264.8''$ を掛けて単位を変換）

$$
\begin{bmatrix} v_{\ell 1} \\ v_{\ell 2} \\ v_{\ell 3} \\ v_{\theta 1} \\ v_{\theta 2} \\ v_{\alpha} \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
\dfrac{x^0 - x_A}{\ell_1^0} & \dfrac{y^0 - y_A}{\ell_1^0} \\
0 & 0 \\
\dfrac{x^0 - x_B}{\ell_3^0} & \dfrac{y^0 - y_B}{\ell_3^0} \\
-\dfrac{y^0 - y_A}{(\ell_1^0)^2}\rho & \dfrac{x^0 - x_A}{(\ell_1^2)^2}\rho \\
\dfrac{y^0 - y_B}{(\ell_3^0)^2}\rho & -\dfrac{x^0 - x_B}{(\ell_3^0)^2}\rho \\
\dfrac{y^0 - y_A}{(\ell_1^0)^2}\rho & -\dfrac{x^0 - x_A}{(\ell_1^0)^2}\rho
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{bmatrix}
+
\begin{bmatrix} \ell_1^0 - \ell_1^{ob} \\ \ell_2^0 - \ell_2^{ob} \\ \ell_3^0 - \ell_3^{ob} \\ \theta_1^0 - \theta_1^{ob} \\ \theta_2^0 - \theta_2^{ob} \\ \alpha^0 - \alpha^{ob} \end{bmatrix}
$$

最小二乗法の計算例 （基準点測量）

これから、観測方程式 $\boxed{\mathbf{v}=\mathbf{A}\cdot\Delta\mathbf{x}+\mathbf{w}}$ の係数行列は、

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix} \dfrac{x^0-x_A}{\ell_1^0} & \dfrac{y^0-y_A}{\ell_1^0} \\ 0 & 0 \\ \dfrac{x^0-x_B}{\ell_3^0} & \dfrac{y^0-y_B}{\ell_3^0} \\ -\dfrac{y^0-y_A}{(\ell_1^0)^2}\rho & \dfrac{x^0-x_A}{(\ell_1^2)^2}\rho \\ \dfrac{y^0-y_B}{(\ell_3^0)^2}\rho & -\dfrac{x^0-x_B}{(\ell_3^0)^2}\rho \\ \dfrac{y^0-y_A}{(\ell_1^0)^2}\rho & -\dfrac{x^0-x_A}{(\ell_1^0)^2}\rho \end{bmatrix}
\qquad
\mathbf{w}=\begin{bmatrix} \ell_1^0-\ell_1^{ob} \\ \ell_2^0-\ell_2^{ob} \\ \ell_3^0-\ell_3^{ob} \\ \theta_1^0-\theta_1^{ob} \\ \theta_2^0-\theta_2^{ob} \\ \alpha^0-\alpha^{ob} \end{bmatrix}$$

となるから、最小二乗解は重みPを与えれば、

$$\boxed{\Delta\hat{\mathbf{x}}=-(\mathbf{A}^T\mathbf{P}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{P}\mathbf{w}\quad、\quad\hat{\mathbf{x}}=\mathbf{x}_0+\hat{\Delta}}$$

で計算できる。

最小二乗法の計算例（基準点測量）

観測データ

		x(m)	y(m)
基準点A,Bの座標値	(x_A, y_A)	457.26	1,334.89
	(x_B, y_B)	1,944.41	587.16

		x(m)	y(m)
未知点Pの概略座標値	(x^0, y^0)	1,279.00	2,754.00

		距離(m)	標準偏差(m)
距離観測値	ℓ_1^{ob}	1,639.911	0.030
	ℓ_2^{ob}	1,664.534	0.030
	ℓ_3^{ob}	2,266.075	0.030

		角（度分秒）	標準偏差（秒）
角観測値	θ_1^{ob}（∠PAB）	86° 35'06.5"	5.0"
	θ_2^{ob}（∠ABP）	46° 15'15.0"	5.0"

		角（度分秒）	標準偏差（秒）
方位角観測値	α^{ob}(AからP方向)	30° 06'24.5"	1.0"

最小二乗法の計算例（基準点測量）

数値計算

係数行列

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix} 0.501105 & 0.865387 \\ 0 & 0 \\ -0.293558 & 0.955941 \\ -108.850249 & 63.030070 \\ 86.988281 & 26.713035 \\ 108.850249 & -63.030070 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{w}=\begin{bmatrix} -0.054354 \\ 0.012568 \\ 0.633198 \\ 124.974686 \\ -65.590113 \\ -121.273556 \end{bmatrix}$$

重み行列

$$\mathbf{P}=\sigma_0^2 \sum\nolimits_{\ell_{ob}}^{-1}$$

$$\sigma_0^2 = 1$$

$$\mathbf{P}=\begin{bmatrix} 1/0.03^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/0.03^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/0.03^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/5^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/5^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/1^2 \end{bmatrix}$$

最小二乗法の計算例（基準点測量）

数値計算

補正量 $\hat{\boldsymbol{\Delta}} = -(\mathbf{A}^{T}\mathbf{PA})^{-\mathbf{1}}\mathbf{A}^{\mathbf{T}}\mathbf{Pw} = \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.871094 \\ -0.419921 \end{bmatrix}$ （m）

未知点座標 $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x_0} + \hat{\boldsymbol{\Delta}} = \begin{bmatrix} 1279.00 \\ 2754.00 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0.871094 \\ -0.419921 \end{bmatrix} \cong \begin{bmatrix} 1279.87 \\ 2753.58 \end{bmatrix}$ （m）

未知点座標の精度

$$\hat{\sum}_{\hat{\mathbf{x}}} = \sigma_0^2 (\mathbf{A}^{\mathbf{T}}\mathbf{PA})^{-\mathbf{1}} = \begin{bmatrix} \sigma_x^2 & \sigma_{xy} \\ \sigma_{xy} & \sigma_y^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.00019488 & 0.00022276 \\ 0.00022276 & 0.00042087 \end{bmatrix}$$

$$\Downarrow$$

$$\sigma_x = 0.014 \quad , \sigma_y = 0.021 \quad (m)$$