

最小自乗近似に関する若干の定理—— 最小自乗近似と Chebyshev 近似の関連

尾 崎 雄一郎

1. はじめに

過剰決定の線形方程式の Chebyshev 基準による近似解はリニアール・プログラミングの問題に変換して解くことができる (Collatz and Wetterling [4], pp. 256-67, 尾崎 [11], Rabinowitz [12], Rice [13], pp. 180-1, Rivlin [14], pp. 42-3, Stiefel [15], [16], pp. 44-50, Watson [18], pp. 39-40, Zukhovitskiy and Avdeyeva [19], pp. 190-207 など). 変数の数や方程式の数が多い場合にはこの計算は簡単ではない. しかし, 最小自乗法によって近似解を求める計算は比較的簡単である. Chebyshev 基準による誤差は最小自乗法による近似解から導びかれた誤差に基づく上限と下限の間にあり (Stiefel [16], pp. 54-5), 方程式の数変数の数より 1 つ多い場合, Chebyshev 近似による誤差は最小自乗近似による誤差によって定まるある値に等しい (Cheney [3], pp. 41-2) ことが知られている.

本論文において過剰決定の方程式の数変数の数より 1 つ多い場合, 最小自乗法による近似解は Haar 条件を満たす方程式によって定まる単体のすべての頂点を加重平均したものであることを示し, 最小自乗法による近似解と単体の重心が一致するための条件を見出すとともに, Chebyshev 近似による誤差は最小自乗近似による誤差によって定まるある値に等しいという事実を証明し, これに基づいて Chebyshev 近似解を効率的に求める方法を提案する.

2. 最小自乗法による近似解

変数の数より方程式の数が 1 つ多い過剰決定の連立方程式を

$$(1) \quad \begin{array}{ccccccc} a_{11}x_1 + & a_{12}x_2 + & \cdots & + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\ a_{21}x_1 + & a_{22}x_2 + & \cdots & + & a_{2n}x_n & = & b_2 \\ \vdots & & & & \vdots & & \vdots \\ a_{n+1,1}x_1 + & a_{n+1,2}x_2 + & \cdots & + & a_{n+1,n}x_n & = & b_{n+1} \end{array}$$

とし, i 番目の方程式に対する誤差 e_i を

$$(2) \quad e_i = b_i - (a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{in}x_n) \quad (i=1, \dots, n+1)$$

と定める. 最小自乗法による近似解は,

$$e_1^2 + e_2^2 + \cdots + e_{n+1}^2$$

を最小にすることによって求められるから, これより

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \sum_{i=1}^{n+1} e_i^2}{\partial x_j} = \sum_{i=1}^{n+1} e_i \frac{\partial e_i}{\partial x_j} = \sum_{i=1}^{n+1} e_i (-a_{ij}) = 0 \quad (j=1, \dots, n)$$

である正規方程式

$$\begin{aligned}
 & \sum a_{i1}^2 x_1 + \sum a_{i1} a_{i2} x_2 + \cdots + \sum a_{i1} a_{in} x_n = \sum a_{i1} b_i \\
 & \sum a_{i2} a_{i1} x_1 + \sum a_{i2}^2 x_2 + \cdots + \sum a_{i2} a_{in} x_n = \sum a_{i2} b_i \\
 & \vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \\
 & \sum a_{in} a_{i1} x_1 + \sum a_{in} a_{i2} x_2 + \cdots + \sum a_{in}^2 x_n = \sum a_{in} b_i
 \end{aligned}
 \tag{3}$$

を解くことによってえられる.

(3)の係数行列から定まる行列式を M , (1) から i 番目の方程式を除いた係数行列式を D_i とし, すべての i に対して $D_i \neq 0$ である (Haar 条件) と仮定すると,

$$M = \begin{vmatrix} \sum a_{i1}^2 & \sum a_{i1} a_{i2} & \cdots & \sum a_{i1} a_{in} \\ \sum a_{i2} a_{i1} & \sum a_{i2}^2 & \cdots & \sum a_{i2} a_{in} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \sum a_{in} a_{i1} & \sum a_{in} a_{i2} & \cdots & \sum a_{in}^2 \end{vmatrix}
 \tag{4}$$

$$D_i = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{i-1,1} & a_{i-1,2} & \cdots & a_{i-1,n} \\ a_{i+1,1} & a_{i+1,2} & \cdots & a_{i+1,n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n+1,1} & a_{n+1,2} & \cdots & a_{n+1,n} \end{vmatrix} \neq 0 \quad (i=1, \cdots, n+1)
 \tag{5}$$

である. (3)の係数行列は,

$$\begin{bmatrix} \sum a_{i1}^2 & \sum a_{i1} a_{i2} & \cdots & \sum a_{i1} a_{in} \\ \sum a_{i2} a_{i1} & \sum a_{i2}^2 & \cdots & \sum a_{i2} a_{in} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \sum a_{in} a_{i1} & \sum a_{in} a_{i2} & \cdots & \sum a_{in}^2 \end{bmatrix}
 \tag{6}$$

$$= \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & \cdots & a_{n+1,1} \\ a_{12} & a_{22} & \cdots & a_{n+1,2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{1n} & a_{2n} & \cdots & a_{n+1,n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n+1,1} & a_{n+1,2} & \cdots & a_{n+1,n} \end{bmatrix}$$

と表せる. (6)の両辺の行列式は, 右辺に Binet-Cauchy 定理 (Aitken [1], pp. 98-9, Browne [2], pp. 24-5, Ferrar [5], pp. 50-1, Gantmacher [6], pp. 8-11, Hadley [7], pp. 100-3, Hohn [8], pp. 268-70, Horn and Johnson [9], p. 22, Lancaster and Tismenetsky [10], pp. 39-41, Thrall and Tornheim [17], pp. 127-8 など)を適用すると, (4)と(5)より

$$M = \sum_{i=1}^{n+1} D_i^2
 \tag{7}$$

と表せる.

正規方程式 (3) を Cramer のルールを用いて解くために

$$(8) \quad \begin{bmatrix} \sum a_{i1}^2 & \cdots & \sum a_{i1}a_{i,j-1} & \sum a_{i1}b_i & \sum a_{i1}a_{i,j+1} & \cdots & \sum a_{i1}a_{in} \\ \sum a_{i2}a_{i1} & \cdots & \sum a_{i2}a_{i,j-1} & \sum a_{i2}b_i & \sum a_{i2}a_{i,j+1} & \cdots & \sum a_{i2}a_{in} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \sum a_{in}a_{i1} & \cdots & \sum a_{in}a_{i,j-1} & \sum a_{in}b_i & \sum a_{in}a_{i,j+1} & \cdots & \sum a_{in}^2 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & \cdots & a_{n+1,1} \\ a_{12} & a_{22} & \cdots & a_{n+1,2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{1n} & a_{2n} & \cdots & a_{n+1,n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1,j-1} & b_1 & a_{1,j+1} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \cdots & a_{2,j-1} & b_2 & a_{2,j+1} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n+1,1} & \cdots & a_{n+1,j-1} & b_{n+1} & a_{n+1,j+1} & \cdots & a_{n+1,n} \end{bmatrix}$$

という関係を用いる. (5) から第 h 行, 第 j 列を除いてできる小行列式を $D_i(h, j)$ と表し, (8) の行列式を考え, (8) の右辺の行列式に Binet-Cauchy 定理を適用すると,

$$\begin{aligned} & D_1 \sum_{h=1}^n (-1)^{h+j} D_1(h, j) b_{h+1} + D_2 \left[(-1)^{1+j} D_2(1, j) b_1 + \sum_{h=2}^n (-1)^{h+j} D_2(h, j) b_{h+1} \right] \\ & + D_3 \left[\sum_{h=1}^2 (-1)^{h+j} D_3(h, j) b_h + \sum_{h=3}^n (-1)^{h+j} D_3(h, j) b_{h+1} \right] + \cdots \\ & + D_{n+1} \sum_{h=1}^n (-1)^{h+j} D_{n+1}(h, j) b_h \end{aligned}$$

となる. これを b_i で整理すると, (8) の右辺の行列式は

$$(9) \quad \begin{aligned} & (-1)^{1+j} b_1 \sum_{i=2}^{n+1} D_i \cdot D_i(1, j) + b_2 \left[(-1)^{1+j} D_1 \cdot D_1(1, j) + (-1)^{2+j} \sum_{i=3}^{n+1} D_i \cdot D_i(2, j) \right] \\ & + b_3 \left[(-1)^{2+j} \sum_{i=1}^2 D_i \cdot D_i(2, j) + (-1)^{3+j} \sum_{i=4}^{n+1} D_i \cdot D_i(3, j) \right] + \cdots \\ & + b_n \left[(-1)^{n-1+j} \sum_{i=1}^{n-1} D_i \cdot D_i(n-1, j) + (-1)^{n+j} D_{n+1} \cdot D_{n+1}(n, j) \right] \\ & + (-1)^{n+j} b_{n+1} \sum_{i=1}^n D_i \cdot D_i(n, j) \end{aligned}$$

となる.

定理 1. 最小自乗法による (1) の近似解を $\hat{x}_j$ と表すと,

$$(10) \quad \begin{aligned} \hat{x}_j &= \frac{1}{M} \left\{ \left[(-1)^{1+j} \sum_{h=2}^{n+1} D_h \cdot D_h(1, j) \right] b_1 \right. \\ &+ \left[(-1)^{1+j} D_1 \cdot D_1(1, j) + (-1)^{2+j} \sum_{h=3}^{n+1} D_h \cdot D_h(2, j) \right] b_2 \\ &+ \left[(-1)^{2+j} \sum_{h=1}^2 D_h \cdot D_h(2, j) + (-1)^{3+j} \sum_{h=4}^{n+1} D_h \cdot D_h(3, j) \right] b_3 \\ &\quad \dots\dots\dots \\ &\left. + \left[(-1)^{n+j} \sum_{h=1}^n D_h \cdot D_h(n, j) \right] b_{n+1} \right\} \quad (j=1, \dots, n) \end{aligned}$$

である.

証明. 正規方程式 (3) を Cramer のルールを用いて解くと, (4), (8), (9) より (10) をえる. $\square$

3. 最小自乗法による近似解と n 次元単体の頂点

(1) から i 番目の方程式を除いた連立方程式の解を $x_1^{(i)}, \dots, x_n^{(i)}$ とすると,

$$(11) \quad \begin{array}{ccccccc} a_{11}x_1^{(i)} + a_{12}x_2^{(i)} + \cdots + a_{1n}x_n^{(i)} & = & b_1 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_{i-1,1}x_1^{(i)} + a_{i-1,2}x_2^{(i)} + \cdots + a_{i-1,n}x_n^{(i)} & = & b_{i-1} & (i=1, \dots, n+1) \\ a_{i+1,1}x_1^{(i)} + a_{i+1,2}x_2^{(i)} + \cdots + a_{i+1,n}x_n^{(i)} & = & b_{i+1} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_{n+1,1}x_1^{(i)} + a_{n+1,2}x_2^{(i)} + \cdots + a_{n+1,n}x_n^{(i)} & = & b_{n+1} \end{array}$$

と表せる. (11) を Cramer のルールを用いて解くと,

$$(12) \quad x_j^{(i)} = \frac{1}{D_i} \left[\sum_{h=1}^{i-1} (-1)^{h+j} D_i(h, j) b_h + \sum_{h=i}^n (-1)^{h+j} D_i(h, j) b_{h+1} \right] \quad (i=1, \dots, n+1, j=1, \dots, n)$$

であり, (12) は (1) によってできる n 次元単体の $n+1$ 個の頂点の座標を表す. (12) を用いると,

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n+1} D_i^2 x_j^{(i)} &= D_1 \sum_{h=1}^n (-1)^{h+j} D_1(h, j) b_{h+1} \\ &+ D_2 \left[(-1)^{1+j} D_2(1, j) b_1 + \sum_{h=2}^n (-1)^{h+j} D_2(h, j) b_{h+1} \right] \\ &+ D_3 \left[\sum_{h=1}^2 (-1)^{h+j} D_3(h, j) b_h + \sum_{h=3}^n (-1)^{h+j} D_3(h, j) b_{h+1} \right] \\ &\dots\dots\dots \\ &+ D_{n+1} \sum_{h=1}^n (-1)^{h+j} D_{n+1}(h, j) b_h \end{aligned}$$

が成立する. この式を b_i 毎にまとめると,

$$(13) \quad \begin{aligned} \sum_{i=1}^{n+1} D_i^2 x_j^{(i)} &= (-1)^{1+j} b_1 \sum_{h=2}^{n+1} D_h \cdot D_h(1, j) \\ &+ b_2 \left[(-1)^{1+j} D_1 \cdot D_1(1, j) + (-1)^{2+j} \sum_{h=3}^{n+1} D_h \cdot D_h(2, j) \right] \\ &+ b_3 \left[(-1)^{2+j} \sum_{h=1}^2 D_h \cdot D_h(2, j) + (-1)^{3+j} \sum_{h=4}^{n+1} D_h \cdot D_h(3, j) \right] \\ &\dots\dots\dots \\ &+ (-1)^{n+j} b_{n+1} \sum_{h=1}^n D_h \cdot D_h(n, j) \quad (j=1, \dots, n) \end{aligned}$$

となる. このとき, 次の定理をえる.

定理2. (1) の最小自乗法による近似解 (10) は, (1) によってできる n 次元単体の頂点 (12) を用いて

$$(14) \quad \hat{x}_j = \frac{\sum_{i=1}^{n+1} D_i^2 x_j^{(i)}}{\sum_{h=1}^{n+1} D_h^2} \quad (j=1, \dots, n)$$

と表せる.

証明. (7), (10), (13) より (14) が成立する. $\square$

定理 2 より最小自乗法による近似解 (10) は, (1) によってできる n 次元単体の $n+1$ 個の頂点 (12) の各々を $D_i^2 / \sum_{k=1}^{n+1} D_k^2$ でウェイト付けした値であることがわかる. したがって, 最小自乗法による近似解は n 次元単体の内部にある.

4. 最小自乗法による近似解と n 次元単体の重心が一致するための条件

(1) によってできる n 次元単体の重心の座標を $(x_1^G, \dots, x_n^G)$ とすると, これは n 次元単体の各頂点の座標を用いて

$$(15) \quad x_j^G = \frac{\sum_{i=1}^{n+1} x_j^{(i)}}{n+1} \quad (j=1, \dots, n)$$

と表せる. このとき, 次の定理をえる.

定理 3. 最小自乗法による近似解 (10) と (1) によってできる n 次元単体の重心 (15) が一致するための十分条件は,

$$(16) \quad |D_1| = |D_2| = \dots = |D_n|$$

が成立することである.

証明. (16) が成立すると仮定すると,

$$(17) \quad \frac{D_i^2}{\sum_{k=1}^{n+1} D_k^2} = \frac{1}{n+1} \quad (i=1, \dots, n+1)$$

が成立するから, (14), (15), (17) より

$$(18) \quad \hat{x}_j = x_j^G \quad (j=1, \dots, n)$$

が成立し, 結論をえる. $\square$

定理 4. (16) が成立するならば, 最小自乗法と Chebyshev 基準による近似解, 並びに n 次元単体の重心は一致する.

証明. 尾崎 [11] の定理 4 で示したように, (16) は Chebyshev 基準による近似解と n 次元単体の重心が一致するための必要十分条件でもあるから, 今述べた定理 3 より結論をえる. $\square$

5. 最小自乗法による近似解に対する誤差

本節において最小自乗法による近似解に対する誤差を求める.

補助定理 1. (5) の D_i から第 h 行, 第 j 列を除いてできる小行列式 $D_i(h, j)$ は $i=1, \dots, n+1; h, j=1, \dots, n$ に対して

$$(19) \quad D_i(h, j) = \begin{cases} D_h(i-1, j) & (h < i \text{ であるとき}) \\ D_{h+1}(i, j) & (h \geq i \text{ であるとき}) \end{cases}$$

が成立する.

証明. 任意の $j = 1, \dots, n$ に対して

$$D_1(h, j) = D_{h+1}(1, j) \quad (h=1, \dots, n)$$

$$D_2(h, j) = \begin{cases} D_h(1, j) & (h=1) \\ D_{h+1}(2, j) & (h=2, \dots, n) \end{cases}$$

$$D_3(h, j) = \begin{cases} D_h(2, j) & (h=1, 2) \\ D_{h+1}(3, j) & (h=3, \dots, n) \end{cases}$$

.....

$$D_n(h, j) = \begin{cases} D_h(n-1, j) & (h=1, \dots, n-1) \\ D_{h+1}(n, j) & (h=n) \end{cases}$$

$$D_{n+1}(h, j) = D_h(n, j) \quad (h=1, \dots, n)$$

が成立するから, 結論をえる. □

補助定理2. (5)をその第 h 行で展開すると,

$$(20) \quad D_i = \begin{cases} \sum_{j=1}^n (-1)^{h+j} a_{hj} D_i(h, j) & (h=1, \dots, i-1) \\ \sum_{j=1}^n (-1)^{h-1+j} a_{hj} D_i(h-1, j) & (h=i, \dots, n) \end{cases}$$

と表せる.

証明. D_i を $1 \leq h \leq i-1$ である第 h 行で展開すると (20) の前半の式になり, $i \leq h \leq n$ である第 h 行で展開すると (20) の後半の式をえる. □

次式の左辺は(14)を用いて整理すると,

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n a_{ij} \hat{x}_j &= \frac{1}{M} \left[a_{i1} \sum_{i=1}^{n+1} D_i^2 x_1^{(i)} + a_{i2} \sum_{i=1}^{n+1} D_i^2 x_2^{(i)} + \dots + a_{in} \sum_{i=1}^{n+1} D_i^2 x_n^{(i)} \right] \\ &= \frac{1}{M} \left[D_1^2 \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j^{(1)} + \dots + D_i^2 \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j^{(i)} + \dots + D_{n+1}^2 \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j^{(n+1)} \right] \end{aligned}$$

となり, この右辺に (11) を用いると,

$$(21) \quad \sum_{j=1}^n a_{ij} \hat{x}_j = \frac{1}{M} \left[D_i^2 b_i + \dots + D_{i-1}^2 b_i + D_i^2 \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j^{(i)} + D_{i+1}^2 b_i + \dots + D_{n+1}^2 b_i \right] \quad (i=1, \dots, n+1)$$

となる. (21) の右辺の i 番目の項を (12) を用いて計算すると,

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j^{(i)} &= \frac{a_{i1}}{D_i} \left[\sum_{h=1}^{i-1} (-1)^{h+1} D_i(h, 1) b_h + \sum_{h=i}^n (-1)^{h+1} D_i(h, 1) b_{h+1} \right] \\ &\quad + \frac{a_{i2}}{D_i} \left[\sum_{h=1}^{i-1} (-1)^{h+2} D_i(h, 2) b_h + \sum_{h=i}^n (-1)^{h+2} D_i(h, 2) b_{h+1} \right] \\ &\quad \dots \dots \dots \\ &\quad + \frac{a_{in}}{D_i} \left[\sum_{h=1}^{i-1} (-1)^{h+n} D_i(h, n) b_h + \sum_{h=i}^n (-1)^{h+n} D_i(h, n) b_{h+1} \right] \end{aligned}$$

となる. この式を b_i 毎にまとめて整理すると,

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j^{(i)} = \frac{1}{D_i} & \left[b_1 \sum_{j=1}^n (-1)^{j+1} a_{ij} D_i(1, j) + \cdots + b_{i-1} \sum_{j=1}^n (-1)^{j+i-1} a_{ij} D_i(i-1, j) \right. \\ & \left. + b_{i+1} \sum_{j=1}^n (-1)^{j+i} a_{ij} D_i(i, j) + \cdots + b_{n+1} \sum_{j=1}^n (-1)^{j+n} a_{ij} D_i(n, j) \right] \end{aligned}$$

となる. この式の右辺を補助定理 1 の (19) を用いて書き変えると,

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j^{(i)} = \frac{1}{D_i} & \left[b_1 \sum_{j=1}^n (-1)^{j+1} a_{ij} D_1(i-1, j) + \cdots + b_{i-1} \sum_{j=1}^n (-1)^{j+i-1} a_{ij} D_{i-1}(i-1, j) \right. \\ & \left. + b_{i+1} \sum_{j=1}^n (-1)^{j+i} a_{ij} D_{i+1}(i, j) + \cdots + b_{n+1} \sum_{j=1}^n (-1)^{j+n} a_{ij} D_{n+1}(i, j) \right] \end{aligned}$$

となる. この両辺に D_i^2 を掛け, 最初の項において $(-1)^{j+1} = (-1)^{j+1}(-1)^{2i-4} = (-1)^{i-2}(-1)^{i-1+j}$, 最後の項において $(-1)^{j+n} = (-1)^{j+n}(-1)^{2i-2n} = (-1)^{i-n}(-1)^{i+j}$ であることに注意して補助定理 2 の (20) を用いると,

$$(22) \quad D_i^2 \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j^{(i)} = D_i \left[(-1)^{i-2} D_1 b_1 + \cdots + D_{i-1} b_{i-1} + D_{i+1} b_{i+1} + \cdots + (-1)^{i-n} D_{n+1} b_{n+1} \right]$$

をえる. (22) を (21) に代入し, (7) を用い, 整理すると,

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n a_{ij} \hat{x}_j = \frac{1}{\sum_{k=1}^{n+1} D_k^2} & \left\{ b_i \sum_{k=1}^{n+1} D_k^2 + D_i \left[(-1)^{i-2} D_1 b_1 + \cdots + D_{i-1} b_{i-1} - D_i b_i \right. \right. \\ (23) \quad & \left. \left. + D_{i+1} b_{i+1} + \cdots + (-1)^{i-n} D_{n+1} b_{n+1} \right] \right\} \end{aligned}$$

と表せる. 最適解 (14) に対する (2) の e_i を $\hat{e}_i$ と表すと, -1 の指数に注意して (2) と (23) より

$$(24) \quad \hat{e}_i = \frac{(-1)^i D_i \sum_{k=1}^{n+1} (-1)^k D_k b_k}{\sum_{k=1}^{n+1} D_k^2} \quad (i=1, \dots, n+1)$$

と表せる. (24) より

$$(25) \quad |\hat{e}_i| = \frac{|D_i| \left| \sum_{k=1}^{n+1} (-1)^k D_k b_k \right|}{\sum_{k=1}^{n+1} D_k^2} \quad (i=1, \dots, n+1)$$

である. (25) より

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n+1} |\hat{e}_i| &= \frac{\left(\sum_{i=1}^{n+1} |D_i| \right) \left| \sum_{i=1}^{n+1} (-1)^i D_i b_i \right|}{\sum_{k=1}^{n+1} D_k^2} \\ \sum_{i=1}^{n+1} \hat{e}_i^2 &= \frac{\left[\sum_{i=1}^{n+1} (-1)^i D_i b_i \right]^2}{\sum_{k=1}^{n+1} D_k^2} \end{aligned}$$

となる. これらより

$$(26) \quad \frac{\sum_{i=1}^{n+1} \hat{e}_i^2}{\sum_{i=1}^{n+1} |\hat{e}_i|} = \frac{\left| \sum_{i=1}^{n+1} (-1)^i D_i b_i \right|}{\sum_{i=1}^{n+1} |D_i|}$$

をえる.

6. Chebyshev 基準による近似解と誤差

本節で, Chebyshev 基準による近似解に対する誤差を尾崎 [11]に基づいて示す.

(1) の Chebyshev 基準による近似解は, (2) の下で

$$z = \max_{i=1, \dots, n+1} |e_i|$$

を最小にするものであるから,

$$(27) \quad z$$

を次の制約条件の下で最小にする

$$(28) \quad \begin{aligned} a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \dots + a_{in}x_n + z &\geq b_i \quad (i=1, \dots, n+1) \\ -a_{i1}x_1 - a_{i2}x_2 - \dots - a_{in}x_n + z &\geq -b_i \quad (i=1, \dots, n+1) \\ z &\geq 0 \end{aligned}$$

というリニアール・プログラミングの問題の最適解として求められる. この双対問題は,

$$(29) \quad \sum_{i=1}^{n+1} b_i (u_i - v_i)$$

を次の制約条件の下で最大にする

$$(30) \quad \begin{aligned} \sum_{i=1}^{n+1} a_{i1} (u_i - v_i) &= 0 \\ &\dots\dots\dots \\ \sum_{i=1}^{n+1} a_{in} (u_i - v_i) &= 0 \\ \sum_{i=1}^{n+1} (u_i + v_i) &\leq 1 \\ u_i \geq 0, \quad v_i \geq 0 \quad (i=1, \dots, n+1) \end{aligned}$$

と表せる. 主問題と双対問題の最適解を各々 $\tilde{x}_i$, $\tilde{z}$ と $\tilde{u}_i$, $\tilde{v}_i$ と表すと, (1) が過剰決定であることより

$$\tilde{z} > 0$$

であるから, 相補弛緩定理により (30) の $n+1$ 番目の不等式は等号で成立し, $\tilde{u}_i$ と $\tilde{v}_i$ は同じ i に対して同時に正となることはないので,

$$\sum_{i=1}^{n+1} (\tilde{u}_i + \tilde{v}_i) = 1, \quad \tilde{u}_i \tilde{v}_i = 0 \quad (i=1, \dots, n+1)$$

が成立する.

次に, σ_i を ± 1 のいずれかとし,

$$(31) \quad w_i = \begin{cases} u_i & (\sigma_i = 1 \text{ のとき}) \\ v_i & (\sigma_i = -1 \text{ のとき}) \end{cases} \quad (i=1, \dots, n+1)$$

とすると, 先の注意と (31) より双対問題の制約条件 (30) は,

$$\begin{aligned}
& a_{11}\sigma_1 w_1 + a_{21}\sigma_2 w_2 + \cdots + a_{n+1,1}\sigma_{n+1} w_{n+1} = 0 \\
& a_{12}\sigma_1 w_1 + a_{22}\sigma_2 w_2 + \cdots + a_{n+1,2}\sigma_{n+1} w_{n+1} = 0 \\
(32) \quad & \vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \\
& a_{1n}\sigma_1 w_1 + a_{2n}\sigma_2 w_2 + \cdots + a_{n+1,n}\sigma_{n+1} w_{n+1} = 0 \\
& w_1 + w_2 + \cdots + w_{n+1} = 1
\end{aligned}$$

と表せる. (32) の係数からなる行列式を

$$(33) \quad D = \begin{vmatrix} \sigma_1 a_{11} & \sigma_2 a_{21} & \cdots & \sigma_{n+1} a_{n+1,1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \sigma_1 a_{1n} & \sigma_2 a_{2n} & \cdots & \sigma_{n+1} a_{n+1,n} \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{vmatrix}$$

とし,

$$(34) \quad \pi_i = \sigma_1 \cdots \sigma_{i-1} \sigma_{i+1} \cdots \sigma_{n+1} \quad (i=1, \dots, n+1)$$

と表す. (5) と (34) を用いて (33) を最後の行で展開すると,

$$(35) \quad D = \sum_{i=1}^{n+1} (-1)^{n+1+i} \pi_i D_i$$

となる.

他方, σ_1 から σ_{n+1} の各々を

$$(36) \quad \operatorname{sgn}(-1)^{n+2} \sigma_1 D_1 = \operatorname{sgn}(-1)^{n+3} \sigma_2 D_2 = \cdots = \operatorname{sgn}(-1)^{2n+2} \sigma_{n+1} D_{n+1}$$

が成立するように定める. ここで, $x > 0$ ならば $\operatorname{sgn} x = 1$, $x < 0$ ならば $\operatorname{sgn} x = -1$ である.

(5) より (36) の各式はゼロではなく, σ_i の選択によって 1 に等しくなるように定めることも, -1 に等しくなるように定めることもできる. (36) の各式に $\sigma_1 \sigma_2 \cdots \sigma_{n+1}$ を掛け, すべての i について $\sigma_i^2 = 1$ であることに注意し, (34) を用いると,

$$(37) \quad \operatorname{sgn}(-1)^{n+2} \pi_1 D_1 = \operatorname{sgn}(-1)^{n+3} \pi_2 D_2 = \cdots = \operatorname{sgn}(-1)^{2n+2} \pi_{n+1} D_{n+1}$$

と表せる. (35) の D は (37) の各項と同符号である. (5), (33), (34) を用いて (32) を Cramer のルールで解くと,

$$(38) \quad \tilde{w}_i = \frac{(-1)^{n+1+i} \pi_i D_i}{D} \quad (i=1, \dots, n+1), \quad \sum_{i=1}^{n+1} \tilde{w}_i = 1$$

である. (37) の各式が 1 に等しくても, -1 に等しくても, (35), (37), (38) より

$$(39) \quad 0 < \tilde{w}_i < 1 \quad (i=1, \dots, n+1)$$

である. (38) より双対問題の目的関数 (29) の値は,

$$(40) \quad \sum_{i=1}^{n+1} b_i (\tilde{u}_i - \tilde{v}_i) = \sum_{i=1}^{n+1} b_i \sigma_i \tilde{w}_i = \frac{\sigma_1 \sigma_2 \cdots \sigma_{n+1} \sum_{i=1}^{n+1} (-1)^{n+1+i} D_i b_i}{D}$$

である.

(39) よりすべての i に対して $\tilde{w}_i > 0$ であるから, 相補弛緩定理より (31) において $\sigma_i = 1$ で $\tilde{w}_i = \tilde{u}_i$ であるときには, (28) の最初の式が等号で成立し, $\sigma_i = -1$ で $\tilde{w}_i = \tilde{v}_i$ であるときには 2 番目の式が等号で成立する. これらより主問題の制約条件 (28) は,

$$(41) \quad \begin{array}{ccccccc} \sigma_1 a_{11} \tilde{x}_1 & + \sigma_1 a_{12} \tilde{x}_2 & + & \cdots & + \sigma_1 a_{1n} \tilde{x}_n & + \tilde{z} = & \sigma_1 b_1 \\ \sigma_2 a_{21} \tilde{x}_1 & + \sigma_2 a_{22} \tilde{x}_2 & + & \cdots & + \sigma_2 a_{2n} \tilde{x}_n & + \tilde{z} = & \sigma_2 b_2 \\ \vdots & \vdots & & & \vdots & \vdots & \vdots \\ \sigma_{n+1} a_{n+1,1} \tilde{x}_1 & + \sigma_{n+1} a_{n+1,2} \tilde{x}_2 & + & \cdots & + \sigma_{n+1} a_{n+1,n} \tilde{x}_n & + \tilde{z} = & \sigma_{n+1} b_{n+1} \end{array}$$

と表せ, (41) の $\tilde{z}$ を Cramer のルールで解くと,

$$(42) \quad \tilde{z} = \frac{\sigma_1 \sigma_2 \cdots \sigma_{n+1} \sum_{i=1}^{n+1} (-1)^{n+1+i} D_i b_i}{D}$$

である。最適解に対する双対問題の目的関数の値 (40) と主問題の目的関数の値 (42) は等しく, (1) が過剰決定であることより $\varepsilon > 0$ である。したがって, (40) の値が正になるように (37) のすべての σ_i を 1 か -1 に定めなくてはならない。

7. 最小自乗近似に対する誤差と Chebyshev 近似に対する誤差の関係

Chebyshev 基準による近似解に対する誤差を $\tilde{e}_i$ と表すと, (2) と (41) より

$$(43) \quad \tilde{z} = \sigma_i \tilde{\ell}_i \quad (i=1, \cdots, n+1)$$

であるから, (42) と (43) より

$$(44) \quad \tilde{z} = |\tilde{e}_i| = \frac{\left| \sum_{i=1}^{n+1} (-1)^{n+1+i} D_i b_i \right|}{|D|} \quad (i=1, \dots, n+1)$$

となる. (35) より

$$|D| = \left| \sum_{i=1}^{n+1} (-1)^{n+1+i} \pi_i D_i \right|$$

であるが、(37)から明らかなように上式の右辺の各項は同符号であるから、(34)に注意して

$$(45) \quad |D| = \sum_{i=1}^{n+1} |(-1)^{n+1+i} \pi_i D_i| = \sum_{i=1}^{n+1} |D_i|$$

となる. したがって, (45) より (44) は

$$(46) \quad |\tilde{e}_i| = \frac{\left| \sum_{i=1}^{n+1} (-1)^{n+1+i} D_i b_i \right|}{\sum_{i=1}^{n+1} |D_i|} \quad (i=1, \dots, n+1)$$

と表せる. これより次の定理が成立する (Cheney [3], pp. 41-2).

定理 5. 最小自乗法による近似解に対する誤差 $\hat{e}_i$ と Chebyshev 基準による近似解に対する誤差 $\tilde{e}_i$ との間に

$$(47) \quad |\tilde{\varrho}_i| = \frac{\sum_{i=1}^{n+1} \hat{\varrho}_i^2}{\sum_{i=1}^{n+1} |\hat{\varrho}_i|} \quad (i=1, \dots, n+1)$$

$$(48) \quad \operatorname{sgn} \tilde{e}_i = \operatorname{sgn} \hat{e}_i \quad (i=1, \cdots, n+1)$$

という関係が成立する.

証明. (26) と (46) より (47) が成立する. また, 変数の数より方程式の数が 1 つ多い (1) の場合, 最小自乗法による近似解は, 定理 2 より (1) によってできる n 次元単位の内部にあり, Chebyshev 基準による近似解も同様に n 次元単体の内部にある (尾崎 [11], 定理 3) ので, (48) が成立する. $\square$

方程式の数が変数の数より 1 つ多い場合, Chebyshev 基準による近似解を求める方法として, 最小自乗法による近似解を求め (これは Chebyshev 近似解を求めるよりはずっと簡単である), 次に定理 5 の (47) と (48) より Chebyshev 基準の下での各々の方程式に対する誤差の値とその符号が求まるから, (2) の任意の n 個の方程式を解けば, Chebyshev 基準による近似解が求まる. このようにして Chebyshev 近似解を効率的に求めることができる.

8. 数値例

本論文で扱った定理に関する数値例を 2 題取り上げる.

例題 1. 過剰決定の連立方程式を

$$(49) \quad \begin{aligned} 2x_1 + 2x_2 &= 8 \\ -x_1 + 2x_2 &= 8 \\ -2x_1 + x_2 &= -5 \end{aligned}$$

とする (過剰決定の方程式の場合, 最初の方程式を 2 で割ることはできない).

これらより各々の方程式に対する誤差は, (2) に基づいて

$$(50) \quad \begin{aligned} e_1 &= 8 - 2x_1 - 2x_2 \\ e_2 &= 8 + x_1 - 2x_2 \\ e_3 &= -5 + 2x_1 - x_2 \end{aligned}$$

であるから, 誤差の自乗和は

$$\sum_{i=1}^3 e_i^2 = 9x_1^2 + 9x_2^2 - 36x_1 - 54x_2 + 153$$

となり, これを最小にする正規方程式は

$$\begin{aligned} 9x_1 &= 18 \\ 9x_2 &= 27 \end{aligned}$$

となる. したがって, 最小自乗法による近似解は,

$$(51) \quad \hat{x}_1 = 2, \quad \hat{x}_2 = 3$$

であり, これは第 1 図の点 L_2 で示される. (51) に対する誤差は, (50) より

$$(52) \quad \hat{e}_1 = -2, \quad \hat{e}_2 = 4, \quad \hat{e}_3 = -4$$

となる. (49) から最初の方程式を除いた残りの方程式の交点を A, 2 番目の方程式を除いた他の方程式の交点を B, 3 番目の方程式を除いてできる交点を C とすると, 各々の交点の座標は,

$$(x_1^{(1)}, x_2^{(1)}) = (6, 7), \quad (x_1^{(2)}, x_2^{(2)}) = (3, 1), \quad (x_1^{(3)}, x_2^{(3)}) = (0, 4)$$

である. (5) の定義を (49) に適用すると,

$$D_1 = 3, \quad D_2 = 6, \quad D_3 = 6$$

であるから, (7) より

$$M = D_1^2 + D_2^2 + D_3^2 = 81$$

である. したがって, (49) の最小自乗法による近似解 (51) は 2 次元単体 ABC の 3 つの頂点を用いて

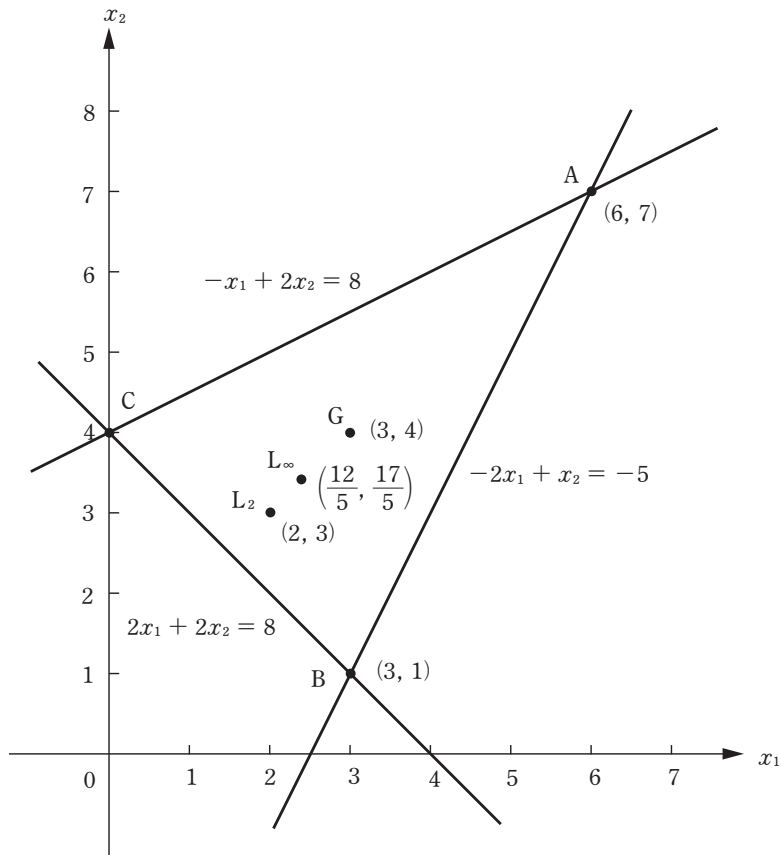
$$\hat{x}_1 = \frac{D_1^2 x_1^{(1)} + D_2^2 x_1^{(2)} + D_3^2 x_1^{(3)}}{M} = \frac{3^2 \times 6 + 6^2 \times 3 + 6^2 \times 0}{81} = 2$$

$$\hat{x}_2 = \frac{D_1^2 x_2^{(1)} + D_2^2 x_2^{(2)} + D_3^2 x_2^{(3)}}{M} = \frac{3^2 \times 7 + 6^2 \times 1 + 6^2 \times 4}{81} = 3$$

となり, 定理 2 の (14) が成立している. 2 次元単体 ABC の重心 G の座標 x_j^G は,

$$x_1^G = \frac{x_1^{(1)} + x_1^{(2)} + x_1^{(3)}}{3} = \frac{6 + 3 + 0}{3} = 3 \neq \hat{x}_1$$

$$x_2^G = \frac{x_2^{(1)} + x_2^{(2)} + x_2^{(3)}}{3} = \frac{7 + 1 + 4}{3} = 4 \neq \hat{x}_2$$



第1図

であり, これは最小自乗近似解と等しくない.

(52) より

$$(53) \quad \begin{aligned} \sum_{i=1}^3 \hat{e}_i^2 &= (-2)^2 + 4^2 + (-4)^2 = 36 \\ \sum_{i=1}^3 |\hat{e}_i| &= |-2| + |4| + |-4| = 10 \end{aligned}$$

である. Chebyshev 基準による近似解に対する誤差 $\tilde{e}_i$ は, 定理 5 の (47) と (48) を (52) と (53) に適用すると,

$$\begin{aligned} |\tilde{e}_i| &= \frac{\sum_{k=1}^3 \hat{e}_k^2}{\sum_{k=1}^3 |\hat{e}_k|} = \frac{36}{10} = \frac{18}{5} \quad (i=1, 2, 3) \\ \operatorname{sgn} \tilde{e}_i &= \operatorname{sgn} \hat{e}_i \quad (i=1, 2, 3) \end{aligned}$$

が成立するから,

$$\tilde{e}_1 = -\frac{18}{5}, \quad \tilde{e}_2 = \frac{18}{5}, \quad \tilde{e}_3 = -\frac{18}{5}$$

となる. これらと (50) より

$$\begin{aligned} 8 - 2\tilde{x}_1 - 2\tilde{x}_2 &= -\frac{18}{5} \\ 8 + \tilde{x}_1 - 2\tilde{x}_2 &= \frac{18}{5} \\ -5 + 2\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2 &= -\frac{18}{5} \end{aligned}$$

をえる. これらの任意の 2 個の方程式より Chebyshev 基準による近似解は,

$$(54) \quad \tilde{x}_1 = \frac{12}{5}, \quad \tilde{x}_2 = \frac{17}{5}$$

であり, これは第 1 図の点 L_∞ で示される. この場合, 最小自乗法による近似解 (51), Chebyshev 基準による近似解 (54) と単体の重心 G は一致しない.

例題 2. 過剰決定の連立方程式を

$$(55) \quad \begin{aligned} x_1 + 2x_2 &= 4 \\ -x_1 + x_2 &= 2 \\ 2x_1 + x_2 &= 11 \end{aligned}$$

とする.

これより各々の方程式に対する誤差は,

$$(56) \quad \begin{aligned} e_1 &= 4 - x_1 - 2x_2 \\ e_2 &= 2 + x_1 - x_2 \\ e_3 &= 11 - 2x_1 - x_2 \end{aligned}$$

である. これより誤差の自乗和は,

$$\sum_{i=1}^3 e_i^2 = 6x_1^2 + 6x_1x_2 + 6x_2^2 - 48x_1 - 42x_2 + 141$$

となり、これを最小にする正規方程式は

$$\begin{aligned} 2x_1 + x_2 &= 8 \\ x_1 + 2x_2 &= 7 \end{aligned}$$

となる。これより最小自乗法による近似解は、

$$(57) \quad \hat{x}_1 = 3, \quad \hat{x}_2 = 2$$

であり、これは第2図の点 L_2 で示される。(57) に対する誤差は、(56) より

$$(58) \quad \hat{e}_1 = -3, \quad \hat{e}_2 = 3, \quad \hat{e}_3 = 3$$

となる。(55) から最初の方程を除いた他の方程式の交点を A、2 番目の方程式以外の 2 つの方程式の交点を B、3 番目の方程式を除いたときの交点を C とすると、各々の交点の座標は、

$$(x_1^{(1)}, x_2^{(1)}) = (3, 5), \quad (x_1^{(2)}, x_2^{(2)}) = (6, -1), \quad (x_1^{(3)}, x_2^{(3)}) = (0, 2)$$

である。(5) の定義を (55) に用いると、

$$D_1 = -3, \quad D_2 = -3, \quad D_3 = 3$$

であるので、(7) は

$$M = D_1^2 + D_2^2 + D_3^2 = 27$$

となる。これらより最小自乗法による近似解 (57) は 2 次元単体 ABC の 3 つの頂点を用いて

$$\begin{aligned} \hat{x}_1 &= \frac{D_1^2 x_1^{(1)} + D_2^2 x_1^{(2)} + D_3^2 x_1^{(3)}}{M} = \frac{(-3)^2 \times 3 + (-3)^2 \times 6 + 3^2 \times 0}{27} = 3 \\ \hat{x}_2 &= \frac{D_1^2 x_2^{(1)} + D_2^2 x_2^{(2)} + D_3^2 x_2^{(3)}}{M} = \frac{(-3)^2 \times 5 + (-3)^2 \times (-1) + 3^2 \times 2}{27} = 2 \end{aligned}$$

となり、定理 2 の (14) が成立している。このとき、2 次元単体 ABC の重心 G の座標は、

$$\begin{aligned} x_1^G &= \frac{x_1^{(1)} + x_1^{(2)} + x_1^{(3)}}{3} = \frac{3 + 6 + 0}{3} = 3 = \hat{x}_1 \\ x_2^G &= \frac{x_2^{(1)} + x_2^{(2)} + x_2^{(3)}}{3} = \frac{5 - 1 + 2}{3} = 2 = \hat{x}_2 \end{aligned}$$

であり、最小自乗法による近似解と一致し、定理 3 が成立している。

(58) より

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 \hat{e}_i^2 &= (-3)^2 + 3^2 + 3^2 = 27 \\ (59) \quad \sum_{i=1}^3 |\hat{e}_i| &= |-3| + |3| + |3| = 9 \end{aligned}$$

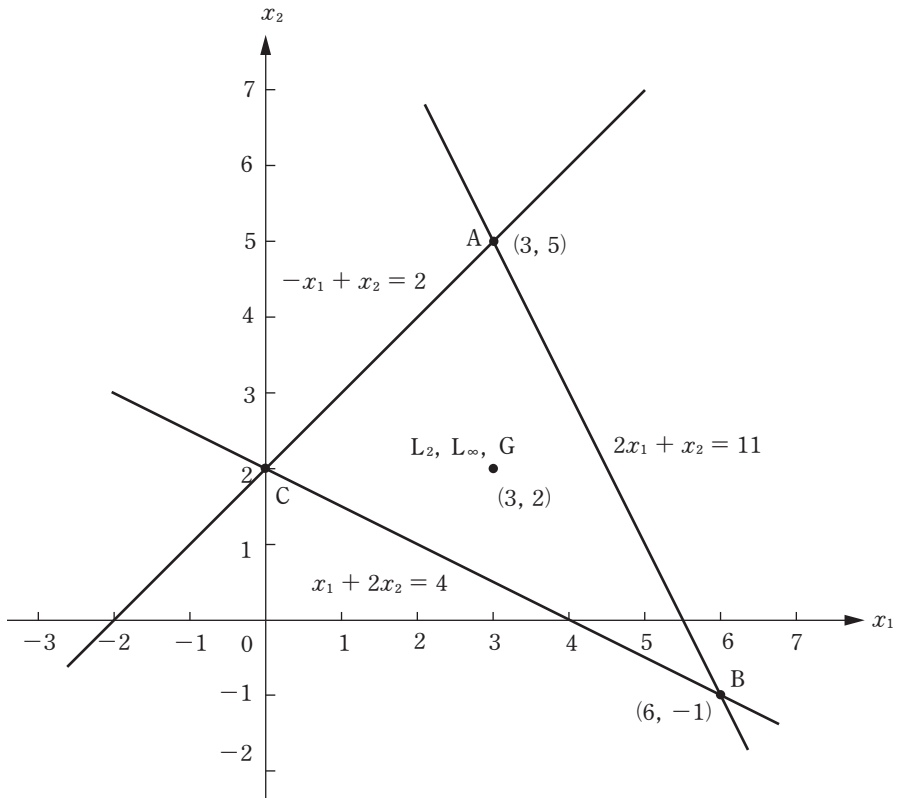
である。Chebyshev 基準による近似解に対する誤差 $\tilde{e}_i$ は、定理 5 の (47) と (48) を (58) と (59) に適用すると、

$$\begin{aligned} |\tilde{e}_i| &= \frac{\sum_{k=1}^3 \hat{e}_k^2}{\sum_{k=1}^3 |\hat{e}_k|} = \frac{27}{9} = 3 \quad (i=1, 2, 3) \\ \operatorname{sgn} \tilde{e}_i &= \operatorname{sgn} \hat{e}_i \quad (i=1, 2, 3) \end{aligned}$$

が成立するから、

$$\tilde{e}_1 = -3, \quad \tilde{e}_2 = 3, \quad \tilde{e}_3 = 3$$

となる。これらと (56) より



第2図

$$4 - \tilde{x}_1 - 2\tilde{x}_2 = -3$$

$$2 + \tilde{x}_1 - \tilde{x}_2 = 3$$

$$11 - 2\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2 = 3$$

をえる. これらの任意の2個の方程式より Chebyshev 基準による近似解は,

$$(60) \quad \tilde{x}_1 = 3, \quad \tilde{x}_2 = 2$$

であり, これは第2図の点 L_∞ で示される.

この場合(16)が成立しているので, 定理4が述べるように, 最小自乗法と Chebyshev 基準による近似解, 単体 ABC の重心が一致する, すなわち,

$$\hat{x}_1 = \tilde{x}_1 = x_1^G = 3, \quad \hat{x}_2 = \tilde{x}_2 = x_2^G = 2$$

が成立している.

参考文献

- [1] Aitken, A. C., *Determinants and Matrices*. Edinburgh: Oliver & Boyd, 1956.
- [2] Browne, E. T., *Introduction to the Theory of Determinants and Matrices*. Chapel Hill, N. C.: The University of North Carolina Press, 1958.
- [3] Cheney, E. W., *Introduction to Approximation Theory*. Second Ed., New York: Chelsea Publishing Co., 1982.

- [4] Collatz, L., and Wetterling, W., *Optimization Problems*, trans. P. Wadsach. New York : Springer-Verlag, 1975.
- [5] Ferrar, W. L., *Algebra : A Text-Book of Determinants, Matrices, and Algebraic Forms*. Second Ed., Oxford : Oxford University Press, 1957.
- [6] Gantmacher, F. R., *The Theory of Matrices*, trans. K. A. Hirsch. Vol. I, New York : Chelsea Publishing Co., 1959.
- [7] Hadley, G., *Linear Algebra*. Reading, Mass. : Addison-Wesley Publishing Co., 1961.
- [8] Hohn, F. E., *Elementary Matrix Algebra*. Third Ed., New York : Dover Publications, 1973.
- [9] Horn, R. A., and Johnson, C. R., *Matrix Analysis*. Cambridge : Cambridge University Press, 1985.
- [10] Lancaster, P., and Tismenetsky, M., *The Theory of Matrices*. Second Ed., New York : Academic Press, 1985.
- [11] 尾崎雄一郎, 「Chebyshev 近似のある基本的な定理とその応用」, 『名城論叢』, 第10巻, 第1号 (2009年), pp. 33-50.
- [12] Rabinowitz, P., "Applications of Linear Programming to Numerical Analysis," *SIAM Review*, Vol. 10(1968), pp. 121-59.
- [13] Rice, J. R., *The Approximation of Functions*, Vol. 1—*Linear Theory*. Reading, Mass. : Addison-Wesley Publishing Co., 1964.
- [14] Rivlin, T. J., *An Introduction to the Approximation of Functions*. New York : Dover Publications, 1981.
- [15] Stiefel, E., "Note on Jordan Elimination, Linear Programming and Tchebycheff Approximation," *Numerische Mathematik*, Vol. 2 (1960), pp. 1-17.
- [16] Stiefel, E., *An Introduction to Numerical Mathematics*, trans. W. C. Rheinboldt and C. J. Rheinboldt. New York : Academic Press, 1963.
- [17] Thrall, R. M., and Tornheim, L., *Vector Spaces and Matrices*. New York : Dover Publications, 1957.
- [18] Watson, G. A. *Approximation Theory and Numerical Methods*. New York : John Wiley & Sons, 1980.
- [19] Zukhovitskiy, S. I., and Avdeyeva, L. I., *Linear and Convex Programming*, trans. Scripta Technica, Inc. Philadelphia, Penn. : W. B. Saunders Co., 1966.