

社会に生きる数学

「数学者」ガウスに学ぶ

速水 謙

自己紹介

- 氏名： 速水 謙 (はやみ けん)
- 所属,職：
国立情報学研究所
情報学プリンシプル研究系, 教授
総合研究大学院大学 複合科学研究科
情報学専攻, 教授 専攻長
(<http://www.nii.ac.jp/graduate/index.html>)
- 研究分野：
数値計算手法の開発と解析,数理工学

あらまし

- ガウスと応用数理
- 最小二乗法について
- ガウスと最小二乗法
- 最小二乗法の応用
- 最小二乗問題の反復解法

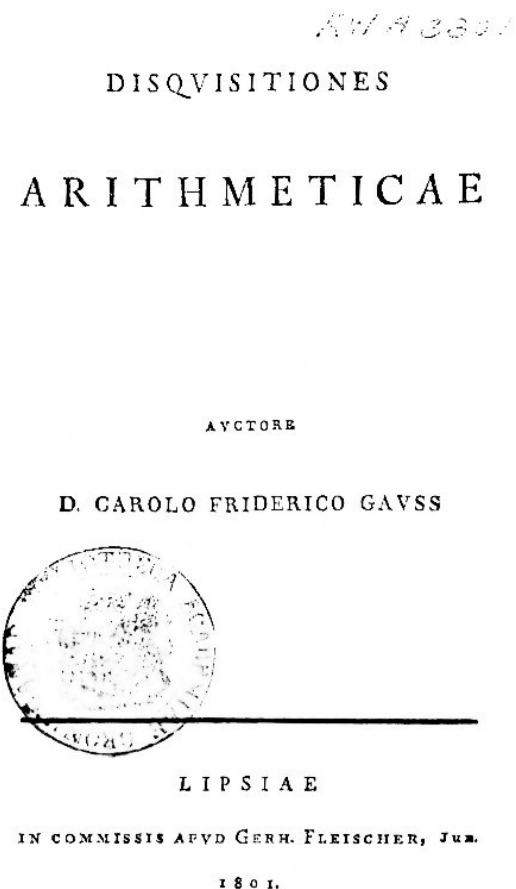
Carl Friedrich Gauss
(1777–1855)
ドイツの数学者



「数学は科学の女王であり、 数論は数学の女王である。」

- 「整数論」に関する大著
- 1798年発行
- ガウス24歳

「数論は数学の中でも
最も美しい」



Godfrey Harold Hardy

(1877－1947)

- 20世紀イギリスの「純粹」数学者
 - 数論が専門
 - 著書:「数学者の弁明」
「数学の価値はそれが美しいかどうかにかかっている。(役に立つかどうかではなく)」
(実は数論は現代の公開鍵暗号に使われている！)



ガウスのその後

(数理工学、応用数理学者として活躍)

- 天文学: 小惑星セレスの軌道の予測
(最小二乗法の発見と活用)
- 測量学:
(最小二乗法の活用, 微分幾何学の構築)
- 電磁気学 (ガウスの定理, 磁束密度の単位)
- 正規分布 (ガウス分布, 測定の誤差論)
- 連立一次方程式の解法
(ガウスの消去法, ガウス・ザイデル法)
- ▪ ▪

数理工学、応用数理とは？

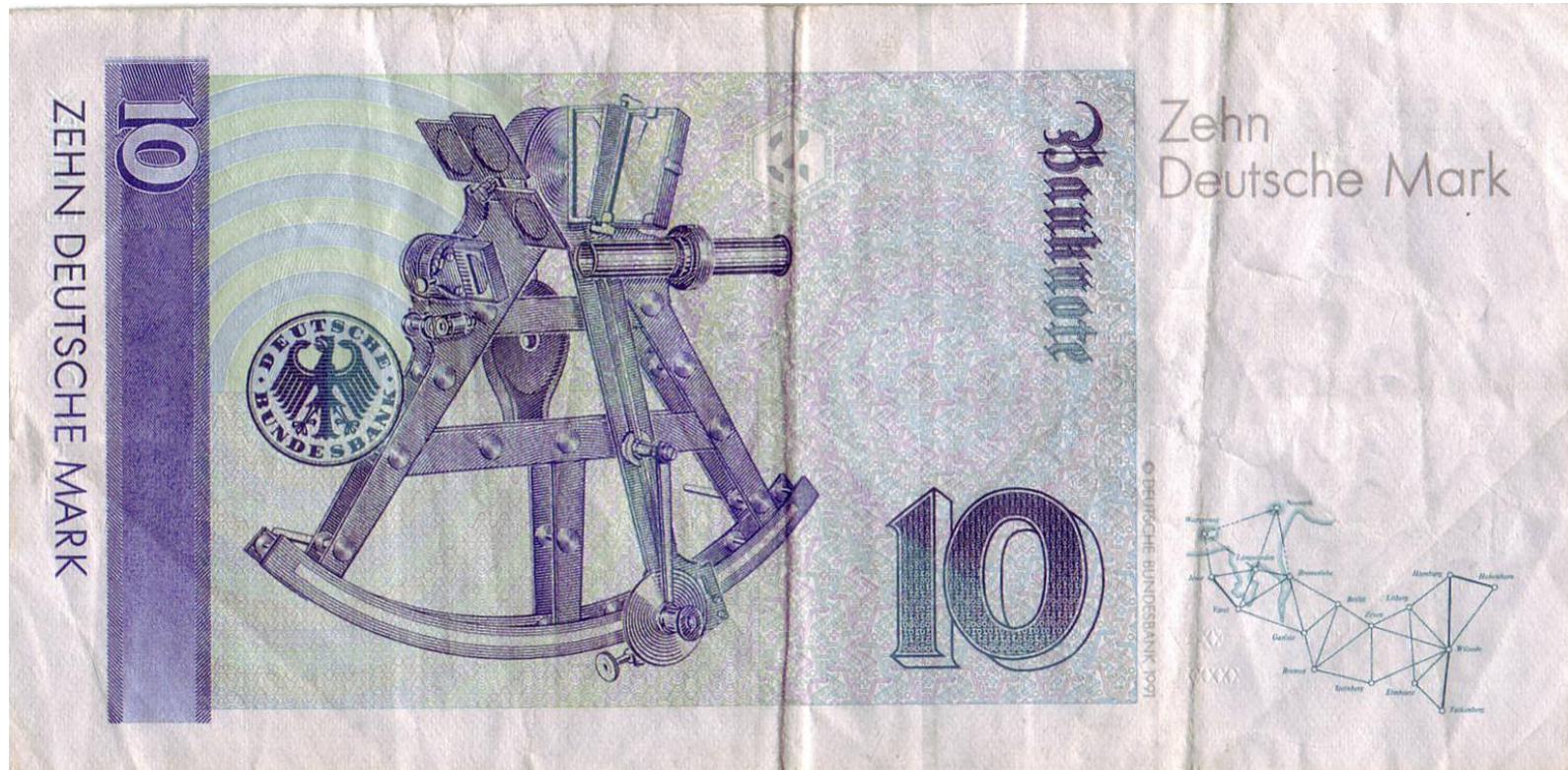
工学、自然、社会現象等の数学モデルを創り
(既存の数学がない場合は新たな数学を創って)
解析し、問題を解決する学問。

ドイツ旧10マルク紙幣(表) (1989-2001)



- ガウスの肖像
- 正規(ガウス)分布曲線
- ゲッチンゲン大学の建物

ドイツ旧10マルク紙幣(裏)



- ガウスが発明したヘリオトロープ(測量器具)
- ハノーヴァー地方の三角測量図

最小二乗法とは？

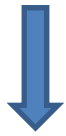
連立一次方程式

$$\begin{cases} 2x + 3y = 5 \cdots (1) \\ 3x - y = 2 \cdots (2) \end{cases}$$

連立一次方程式の解法

$$\begin{cases} 2x + 3y = 5 \cdots (1) \\ 3x - y = 2 \cdots (2) \end{cases}$$

(ガウス) の消去法



連立一次方程式の解法

$$\begin{cases} 2x + 3y = 5 \cdots (1) \\ 3x - y = 2 \cdots (2) \end{cases}$$

(ガウス) の消去法



解 $x = 1, y = 1$

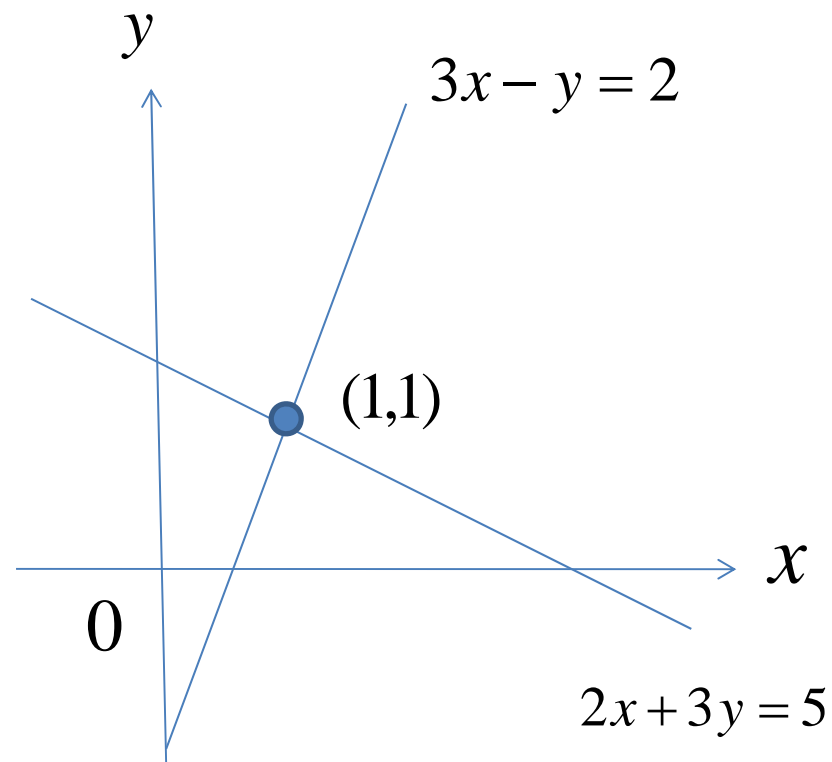
連立一次方程式の幾何学的解釈

$$\begin{cases} 2x + 3y = 5 \cdots (1) \\ 3x - y = 2 \cdots (2) \end{cases}$$

(ガウスの) 消去法



解 $x = 1, y = 1$



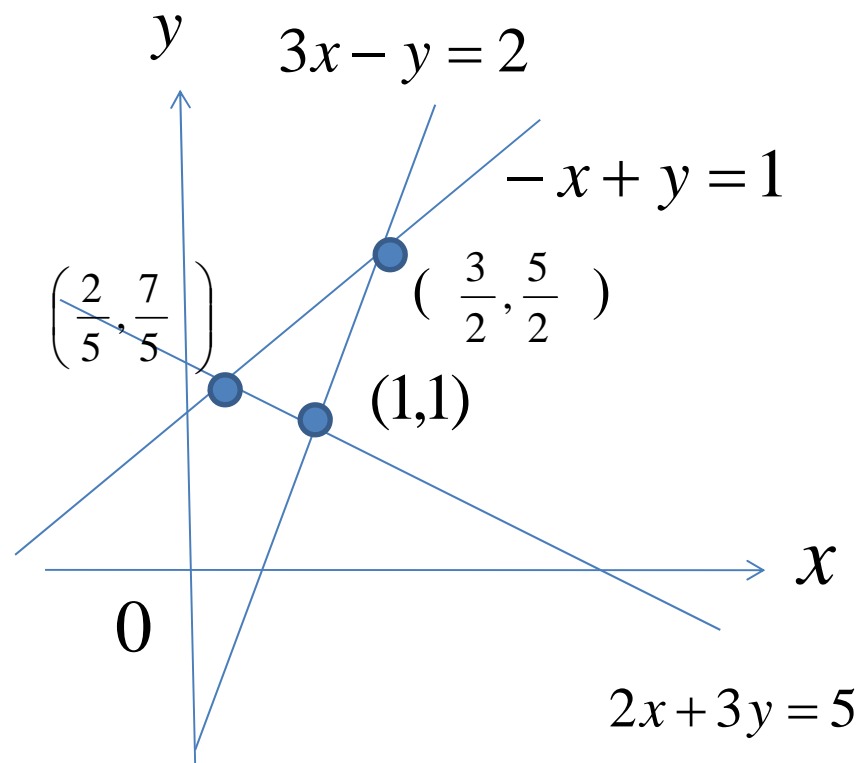
未知数の個数よりも式の数が多い場合は？

$$\begin{cases} 2x + 3y = 5 \cdots (1) \\ 3x - y = 2 \cdots (2) \\ -x + y = 1 \cdots (3) \end{cases}$$

未知数の個数よりも式の数が多い場合は？

$$\begin{cases} 2x + 3y = 5 \cdots (1) \\ 3x - y = 2 \cdots (2) \\ -x + y = 1 \cdots (3) \end{cases}$$

解は存在しない



最小二乗法

$$\begin{cases} 2x + 3y = 5 \cdots (1) \\ 3x - y = 2 \cdots (2) \\ -x + y = 1 \cdots (3) \end{cases}$$

残差の二乗を最小化

$$(2x + 3y - 5)^2 + (3x - 3y - 2)^2 + (-x + y - 1)^2$$

↓

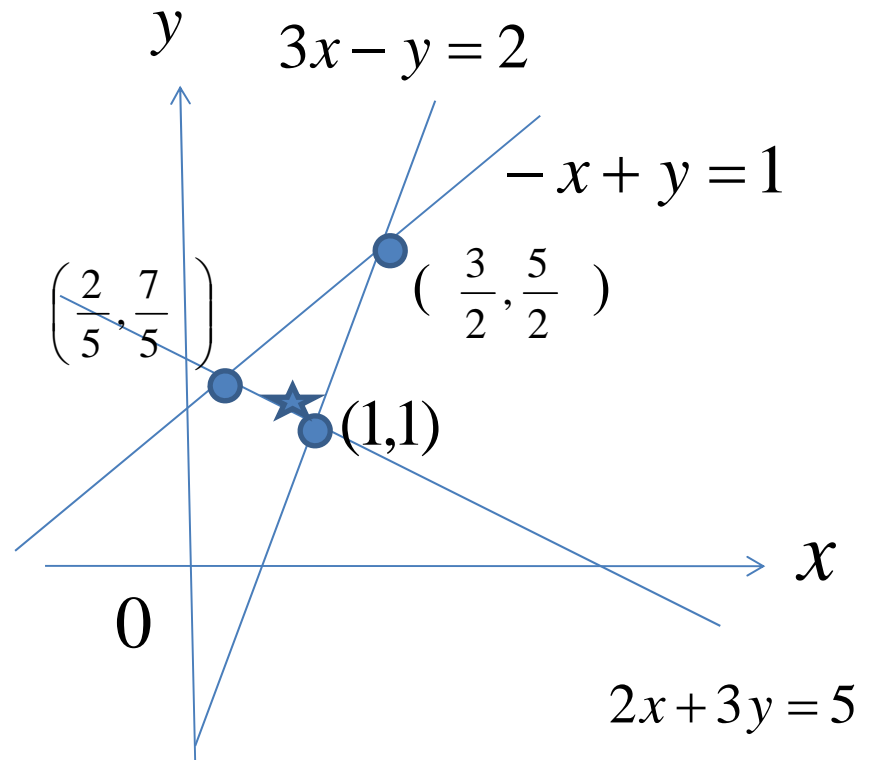
最小化

最小二乘解

$$\begin{cases} 2x + 3y = 5 \cdots (1) \\ 3x - y = 2 \cdots (2) \\ -x + y = 1 \cdots (3) \end{cases}$$

最小二乘解 ★

$$\left(\frac{137}{150}, \frac{83}{75} \right) \cong (0.913, 1.11)$$



最小二乗解の求め方

$$f(x, y) = (2x + 3y - 5)^2 + (3x - 3y - 2)^2 + (-x + y - 1)^2 \text{ が最小}$$



$$\frac{\partial f}{\partial x} = 0 \iff 14x + 2y = 5$$

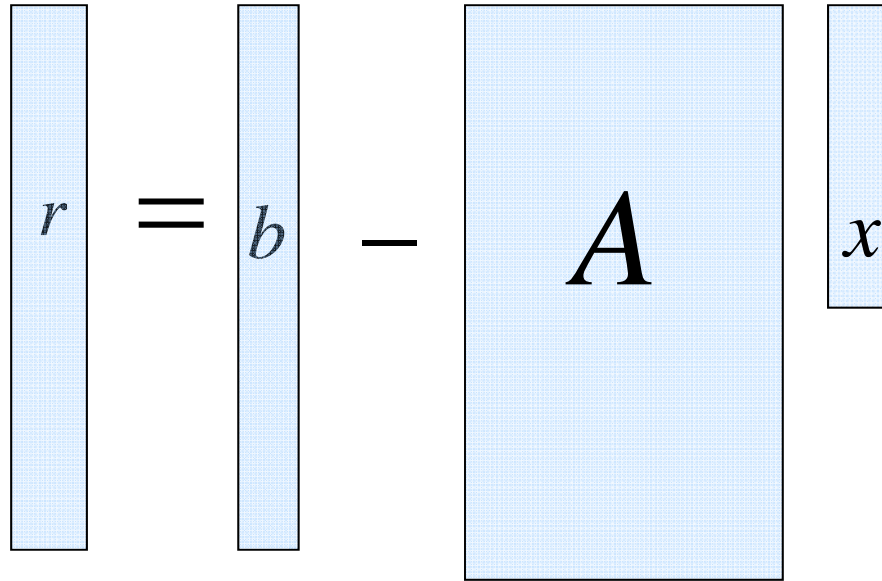
$$\frac{\partial f}{\partial y} = 0 \iff 2x + 11y = 14$$



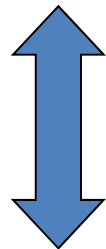
最小二乗解

$$(x, y) = \left(\frac{137}{150}, \frac{83}{75} \right) \cong (0.913, 1.11)$$

一般には

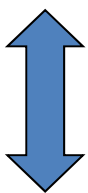
$$r = b - Ax$$


$\|r\|_2^2 = r^T r$ の最小化 (最小二乗問題)



正規方程式(連立一次方程式)

$$\boxed{A^T} \boxed{A} \boxed{x} = \boxed{A^T A} \boxed{x} = \boxed{A^T b}$$



最小二乘解： $x = (A^T A)^{-1} A^T b$

なぜ二乗か？

$\beta_i = ax_i + b$, 観測値 y_i

確率

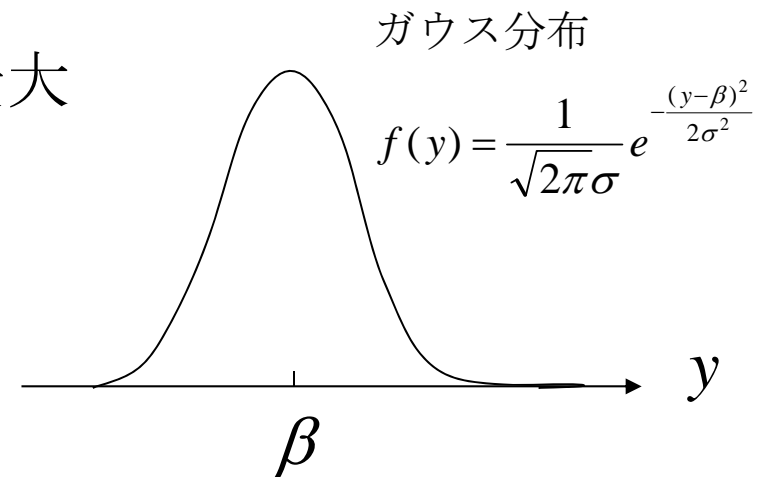
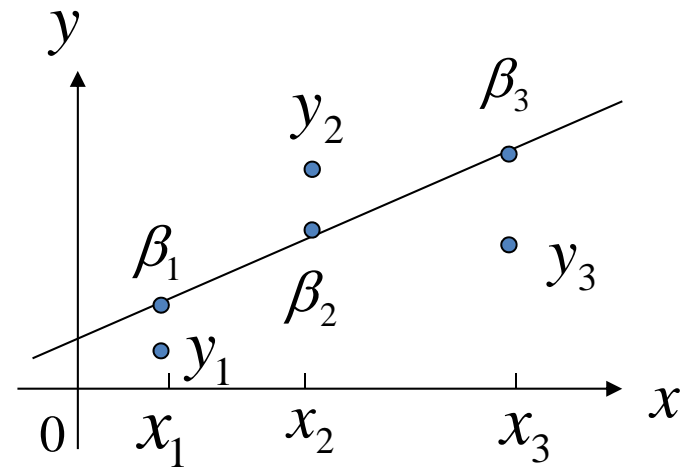
$$P(0 \leq y_i - \beta_i \leq \Delta y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(y_i - \beta_i)^2}{2\sigma^2}} \Delta y$$

同時確率

$$\left(\frac{\Delta y}{\sqrt{2\pi}\sigma}\right)^3 \prod_{i=1}^3 e^{-\frac{(y_i - \beta_i)^2}{2\sigma^2}} = \left(\frac{\Delta y}{\sqrt{2\pi}\sigma}\right)^3 e^{-\frac{\sum_{i=1}^3 (y_i - \beta_i)^2}{2\sigma^2}} \rightarrow \text{最大}$$

\Updownarrow

$$\sum_{i=1}^3 (y_i - \beta_i)^2 \rightarrow \text{最小}$$



(文献[6] Abdulle, Wanner)

最小二乗法の応用

実験、観測データの解析

$$ax_1 + b = y_1 + \varepsilon_1$$

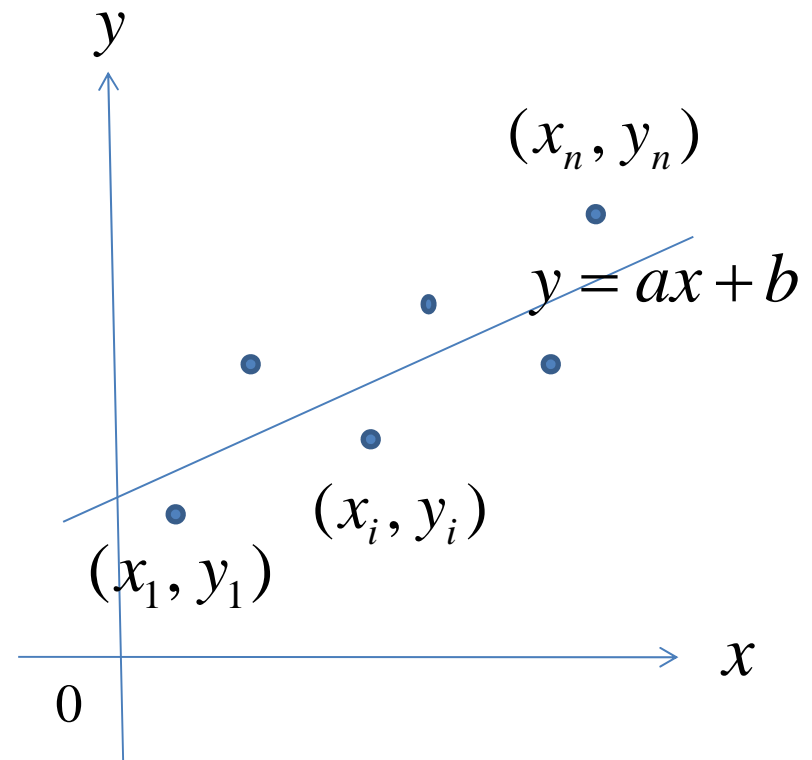
$$ax_2 + b = y_2 + \varepsilon_2$$

⋮

$$ax_n + b = y_n + \varepsilon_n$$

誤差の二乗和を最小にする。

$$\sum_{i=1}^n \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^n (ax_i + b - y_i)^2 \rightarrow \text{最小}$$



ガウスと最小二乗法

- ラプラスが「最小一乗法」を発表(1799)
- ガウスが小惑星Ceresの軌道予測(1801)

- ・1801年1月1日,イタリアの天文学者Piazziが発見,2月11日まで追跡
- ・9月にガウスが軌道を計算,予測,12月7日に予測通りに再発見
- ・その後最小二乗法を用いて軌道を精密に計算

- ルジャンドル,最小二乗法を発表(1805)
- ガウス,最小二乗法の原理を説明(1809)

1795年に発見したと主張。「なぜ二乗か？」をガウス分布を用いて説明。

(ガウスの消去法にも言及。) ルジャンドルの反論

- ガウス,最小二乗法の論文を発表(1823)

ガウス分布に限らず一般の誤差分布に対する最適性を示す。

Pierre-Simon Laplace (1749-1827)



フランスの数学者
天体力学, 確率論, 微分方程式論などに貢献
「ラプラス変換」

ガウスによる小惑星Ceresの軌道予測

1801	Longitude	Latitude		Longitude	Latitude
Jan. 1	53° 23' 06.38"	3° 06' 45.16"	23	53° 44' 12.46"	1° 38' 46.78"
2	53° 19' 38.18"	3° 02' 26.46"	28	54° 15' 18.52"	1° 21' 04.92"
3	53° 16' 37.70"	2° 58' 08.04"	30	54° 30' 10.52"	1° 14' 14.24"
4	53° 14' 21.44"	2° 53' 51.98"	31	54° 38' 05.58"	1° 10' 51.02"
10	53° 07' 57.64"	2° 28' 53.64"	Feb. 1	54° 46' 27.14"	1° 07' 34.18"
13	53° 10' 05.60"	2° 16' 46.08"	2	54° 55' 01.52"	1° 04' 18.10"
14	53° 11' 54.20"	2° 12' 54.02"	5	55° 22' 45.20"	0° 54' 34.54"
19	53° 26' 01.98"	1° 53' 37.82"	8	55° 53' 04.52"	0° 45' 08.28"
21	53° 34' 22.68"	1° 46' 13.06"	11	56° 26' 28.20"	0° 35' 55.02"
22	53° 39' 11.58"	1° 42' 28.80"			

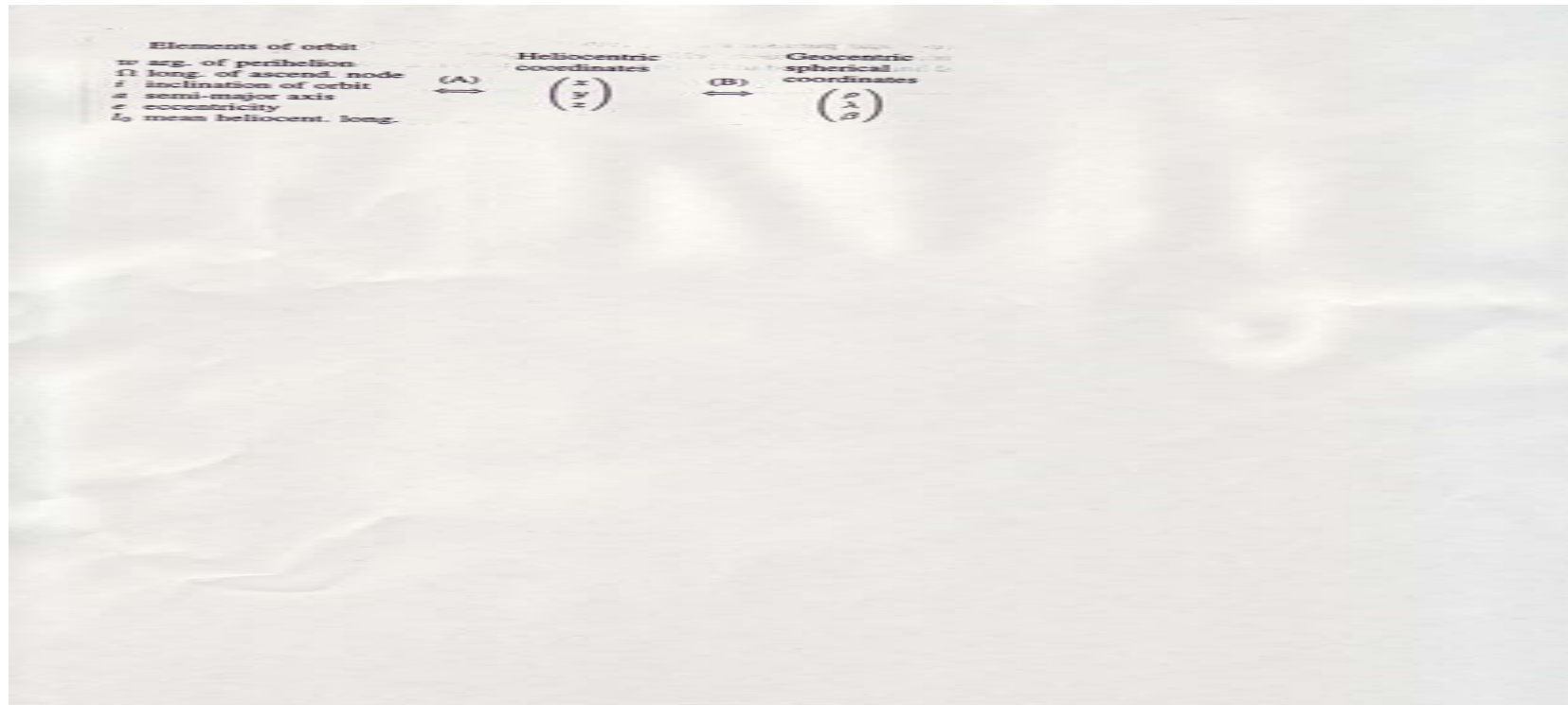
Table 1.1 The observations of Piazzi

Sonnenferne	326° 53' 50"
Ω	81° 1' 44"
Neigung der Bahn	10° 36' 21"
Logarithmus der halben grossen Axe	0.4414902
Excentricität	0.0819603
Epoche: 31 Dec. 1800 mittl. helioc. Länge	77° 54' 29"

Table 1.2 The elements of Ceres (Gauss Dec. 1801)

(文献[6] Abdulle, Wanner)

ガウスの予測法



Kepler の法則と非線形方程式 の解法



後に非線形最小二乗法 (*Gauss - Newton* 法)を用いる

(文献[6] Abdulle, Wanner)

Adrien - Marie Legendre (1752-1833)



フランスの数学者。

統計学、数論、代数学、解析学に貢献

最小二乗法の測地学への応用(ガウス)

子午線上の測地データをもとに地球の楕円度を計算.(1799)

(子午線の四分円の一千万分の一:1メートルの最初の定義に用いた)

D: Dunkirk

P: Paris(Pantheon)

E: Evaux

C: Carcassone

B: Barcelona

(文献[7], *Stigler*)

468

STEPHEN M. STIGLER

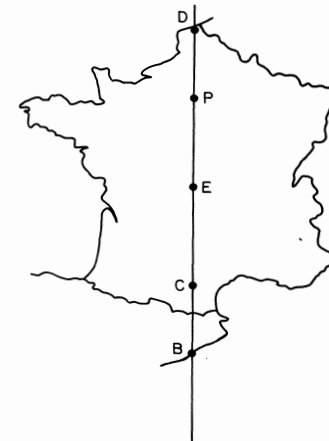


FIG. 1. The French meridian arc, through Dunkirk (D), the Pantheon (P) in Paris, Evaux (E), Carcassone (C), and Barcelona (B).

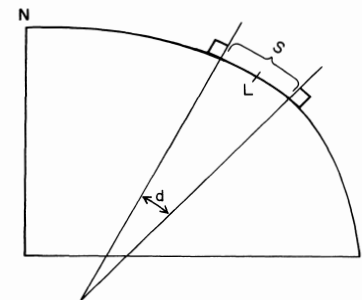


FIG. 2. A meridian quadrant, from the equator (E) to the north pole (N), showing an arc segment of d degrees latitude and length S modules, centered at latitude L .

The extract from *Allgemeine Geographische Ephemeriden* quoted earlier indicates that, based on these data alone, Gauss had first determined the ellipticity of the earth to be $1/50$, then discovered the typographical error and recalculated to find an ellipticity of $1/187$ and a meridian quadrant of 2565006 modules. A naive view would hold that by

最小二乗法の応用(1)

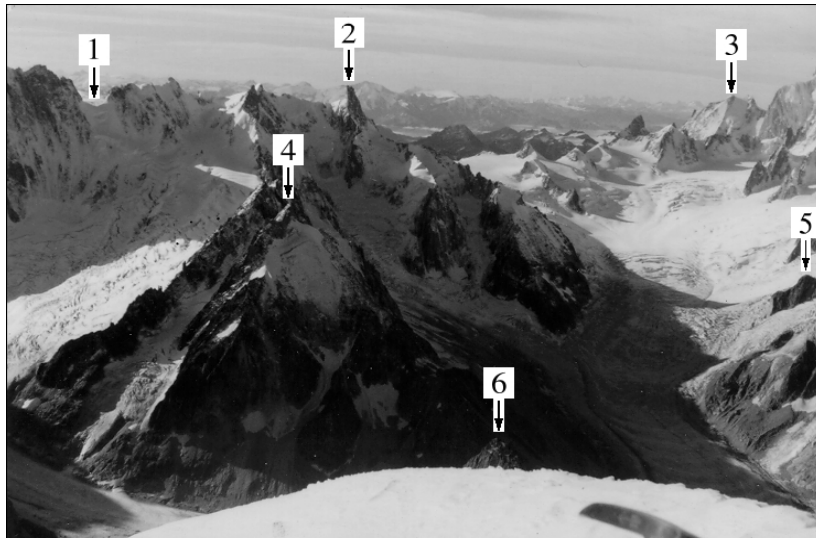


Fig. 4.1 A photograph from the Montblanc region (Photo: G. Wanner).
 corresponding space coordinates (x_i, y_i, z_i) from a map, where the origin for x, y is placed arbitrarily and z are the altitudes. The task is to find out the position of the camera, its focus and its angle of inclination. A copy of the map, the Swiss national map 1:50 000 (scale 5003), can be found under <http://www.unige.ch/math/olteck/wanner/polycop.html>. In Table 4.1 are given the values used in our calculations.

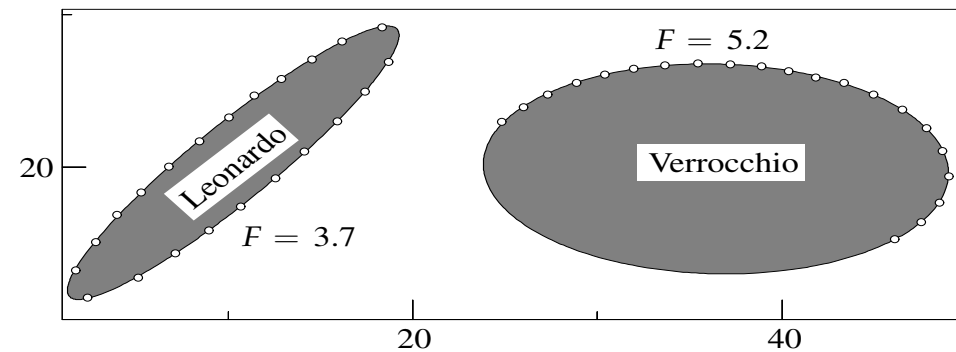
i	x_i	y_i	z_i	x_i	y_i	z_i
1. Col des Grandes Jorasses	0.0480	0.0290	9855	5680	3825	
2. Aiguille du Cour	-0.0184	0.0345	8179	7024	4013	
3. Aig. Blanche du Peutyrey	0.0404	0.0285	2885	730	4107	
4. Aiguille du Tournal	-0.0193	0.0115	8009	7530	3444	
5. Petit Rogiton	0.0604	-0.0065	5760	7025	3608	
6. Aiguille du Nétais	0.0425	-0.0270	8080	1120	3412	

Table 4.1 The data for the camera problem (in meters).
 For the solution of our problem, we denote by (x, y, z) the position in space of the camera's objective, and by $\theta = (a, b, c)$ the perpendicular vector from the objective to the projection plane. Finally, we allow the camera to be rotated around θ by an angle β . There are thus seven unknowns to determine. Very similar to the calculation of Gauss, but much easier, we have, once these 7 variables fixed, to find out the relations between

カメラの位置、方向の同定

(文献[6] Abdulle, Wanner)

最小二乗法の応用(2)



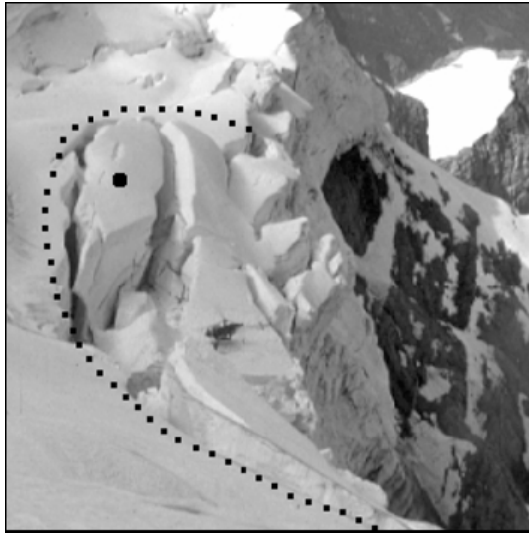
曲線のあてはめ

$$F = \sum_i (Ax_i^2 + 2Bx_iy_i + Cy_i^2 - Dx_i - Ey_i - 1)^2 = \min$$

ダビンチは師を越えた？

(文献[6] Abdulle, Wanner)

最小二乗法の応用(3)



4.4 The hanging glacier above Grindelwald
 In summer 1999 a hanging glacier high up in the mountains above Grindelwald (Switzerland) started to advance and threatened the region below by an enormous ice fall. In order to avoid a serious accident, a precise breaking off forecast was of great importance. Scientists from the ETH Zürich (M. Funk) therefore implanted a surveying stake on the ice masses (see Fig. 4.6, left) and observed carefully the advancing position of the stake. The measured data are reproduced in Fig. 4.6 to the right. The time $t = 0$ corresponds to the 18th of July, 1999, at 7 a.m.

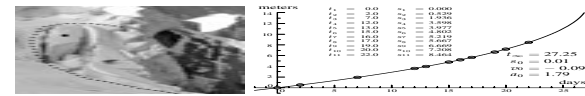


Fig. 4.6 (Left) the Grindelwald hanging glacier with the surveying stake (Photo: M. Funk, from [7]); right: the data and the breaking off forecast

Earlier experiences with ice falls (in particular one at the *Weisshorn*) have shown that the increasing speed of such ice masses satisfies a formula

$$v(t) = v_0 + \frac{a_0}{(t_\infty - t)^n}$$

where $n \approx \frac{1}{2}$. By integrating this, we obtain for the positions

$$s(t) = s_0 + v_0 t + a_0 \left(\frac{(t_\infty - t)^{1-n} - t_\infty^{1-n}}{n-1} \right). \quad (4.5)$$

The problem is now, to determine the unknown constants s_0 , v_0 , a_0 and t_∞ in such a way, that this function approaches the measured data points with minimal least square error. The solutions obtained in this way are given in Fig. 4.6, and predicted the ice fall for $t_\infty = 27.25$, which corresponds to the 14th of August at 1 p.m. Actually, the glacier fell the 14th of August at 2 a.m. The forecast, 5 days before the event, was thus wrong by less than half a day. For more details, see [7].

Conclusion. After having seen, how the observations of a couple of stars have helped to develop modern science in such an extraordinary way, we *must* say, *really*, that stars influence our lives, just not the way readers of horoscopes are believing.

氷河雪崩の予測

雪崩の速さ (経験式)

$$v(t) = v_0 + \frac{a_0}{(t_\infty - t)^n}, \quad n \approx \frac{1}{2}$$

雪崩の位置

$$s(t) = s_0 + v_0 t + a_0 \left(\frac{(t_\infty - t)^{1-n} - t_\infty^{1-n}}{n-1} \right)$$

Grindelwald

$t = 0$: 1999.7.18, 7am

予測: 1999.8.14, 1pm

実際: 1999.8.14, 2am

(文献 [6] Abdulle, Wanner)

最小二乗問題の数値計算法

- 直接法

QR法(Golub, 1965)

(Givens(1958), Householder(1958),

修正Gramm-Schmidt法(Laplace(1820)...))

- 反復法

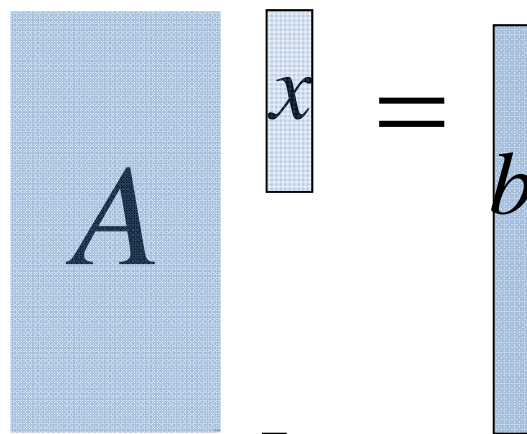
$$x_1 \rightarrow x_2 \rightarrow \cdots \rightarrow x_n$$

「(ガウスの) 消去法とは違い、反復法(ガウス・ザイデル法)は半ば眠っていても計算できる。」(ガウス)

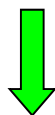
CGLS法(Hestenes, Stiefel, 1952),

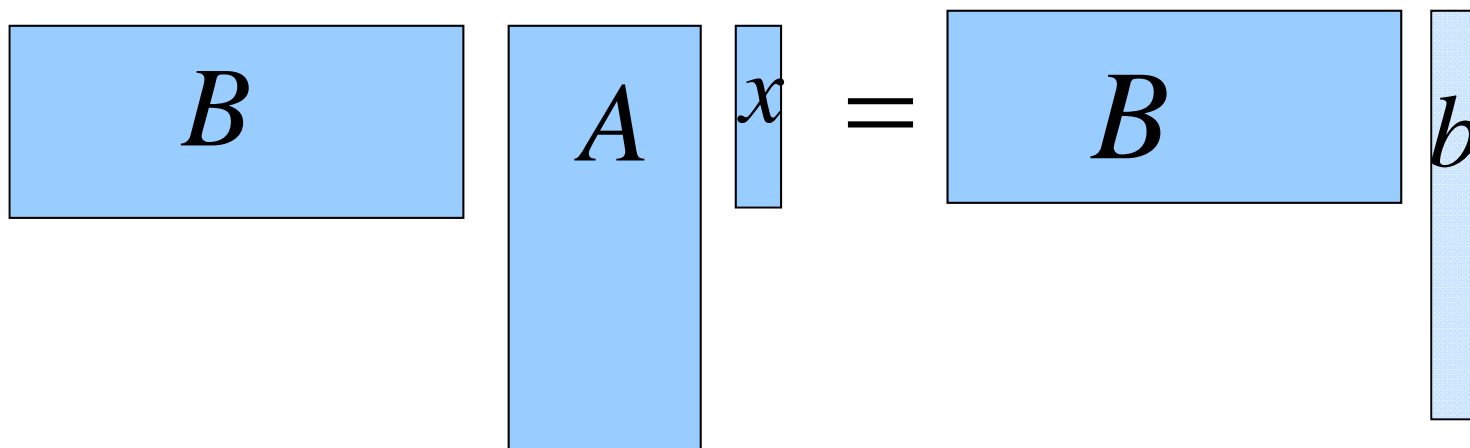
LSQR法(Paige, Saunders, 1982)

大規模最小二乗問題の反復解法


$$A x = b$$

: 最小二乗問題




$$B A x = B b$$

BA法

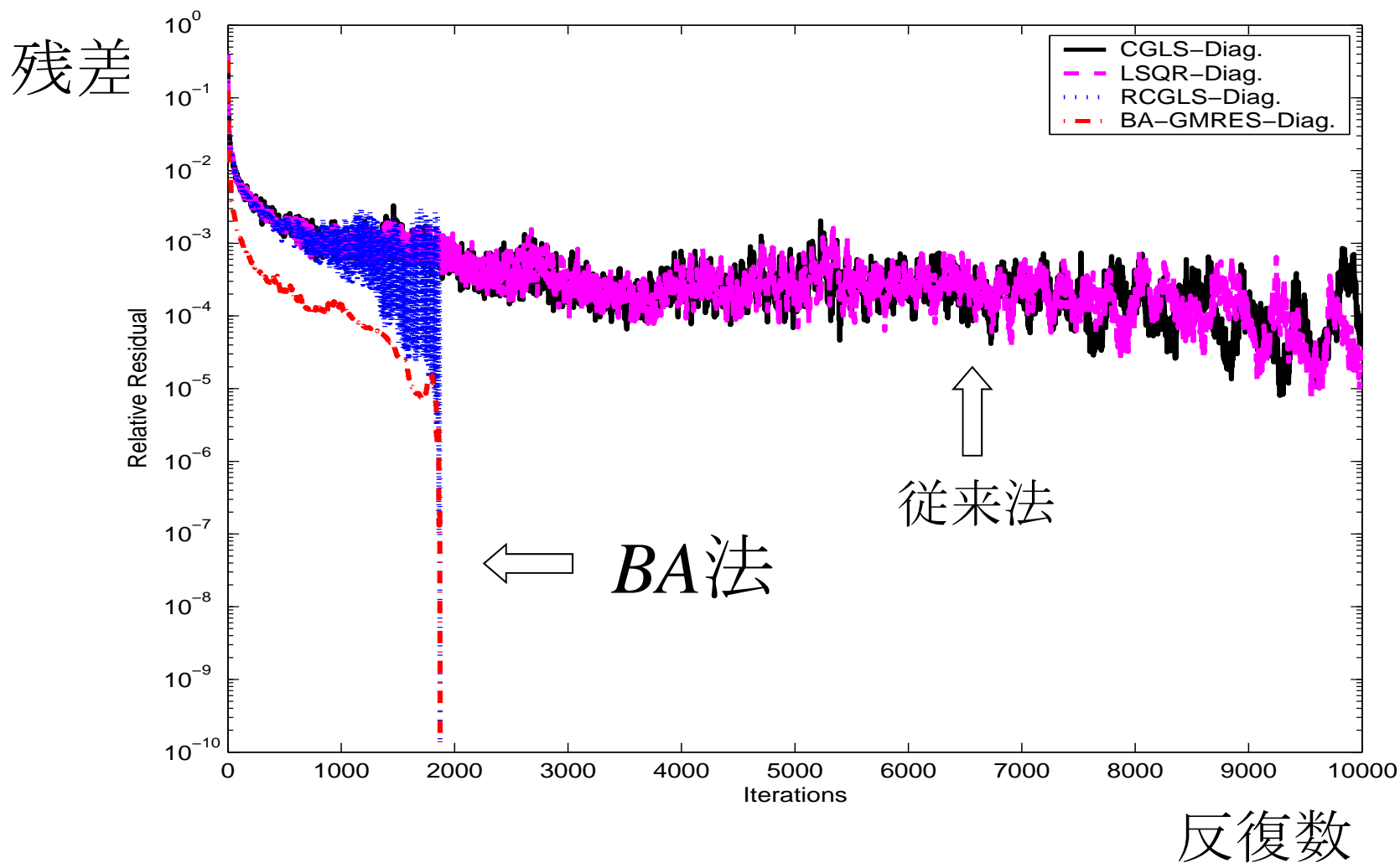
$$\boxed{BA} \begin{matrix} | \\ x \\ | \end{matrix} = \begin{matrix} | \\ Bb \\ | \end{matrix} \quad : \text{連立一次方程式}$$



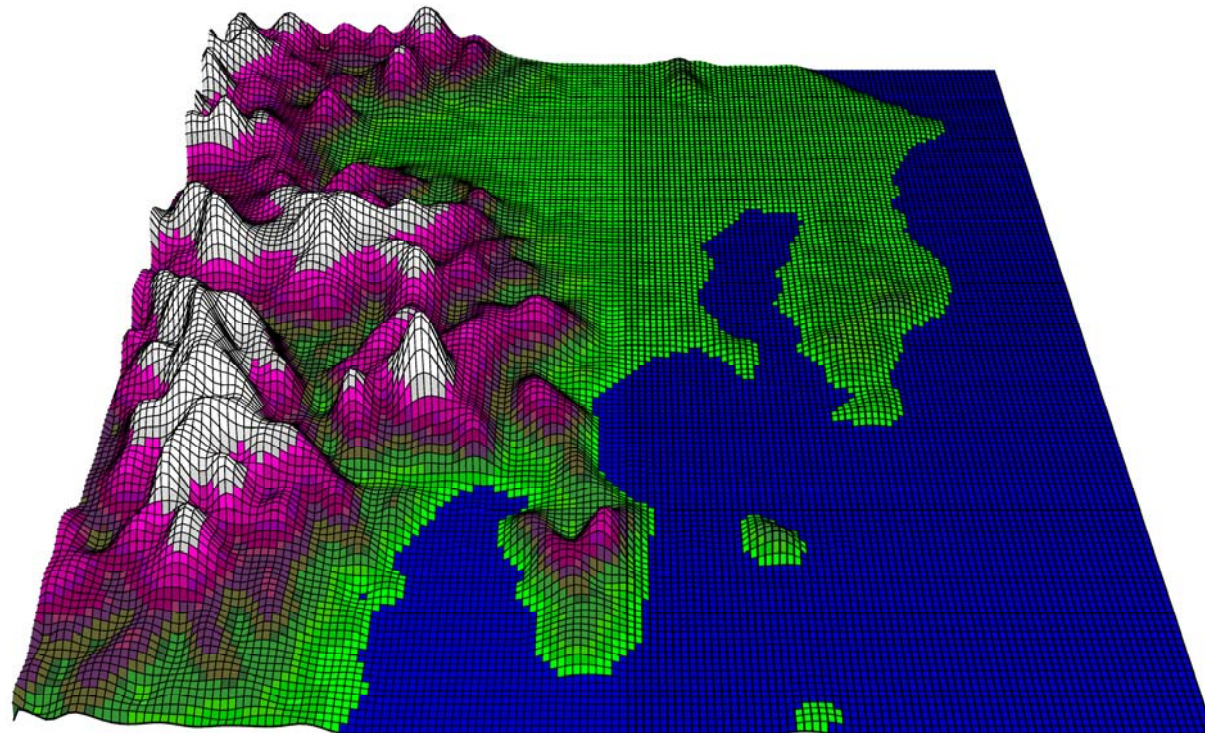
反復法を適用

反復法 (*GMRES*法 : 一般化最小残差法) と
 B (前処理行列 : *RIF*法) の選び方がみそ!

BA法と従来法の比較



BA法の最小二乗問題への適用例



スプラインを用いた地形データの補間 (NII, 橋爪教授作成)

未知数(パラメータ): 3,969個, 方程式(標高データ): 64,009個

まとめ

- ガウスと応用数理
- 最小二乗法について
- ガウスと最小二乗法
- 最小二乗法の応用
- 最小二乗問題の反復解法

参考文献

- [1] S.G.ギンディキン著,三浦伸夫訳,ガウスが切り開いた道,シュプリンガー・フェアラーク東京,1996.
- [2] C.F. Gauss, (A.A. Clarke tr.), *Disquisitiones Arithmeticae*, Yale University Press, 1965.
(C.F. ガウス著, 高瀬正仁訳,ガウス整数論,朝倉書店, 1995.)
- [3] G.H. Hardy, *A Mathematician's Apology*, (With a Foreword by C.P. Snow) , Cambridge University Press, 1940 (1967).
(G.H. ハーディ, C.P. スノー著,柳生孝昭訳,ある数学者の生涯と弁明 , シュプリンガー・フェアラーク東京,1994.)
- [4] 中川徹,小柳義夫,最小二乗法による実験データ解析,東京大学出版会,1982.
- [5] D. Teets, K. Whitehead, The discovery of Ceres: How Gauss became famous, *Mathematics Magazine*, 72, No.2 (1999), 83-93.
- [6] A. Abdulle and G. Wanner, 200 years of least squares method, *Elemente der Mathematik*, 57 (2002), 45-60.
- [7] S. Stigler, Gauss and the invention of least squares, *The Annals of Statistics*, 9, No.3 (1981), 465-474.
- [8] A. Bjorck, *Numerical Methods for Least Squares Problems*, SIAM, 1996.
- [9] 速水 謙, 伊藤 徳史, GMRES法による最小二乗問題の解法, *統計数理*, 53, No. 2 (2005), 331-348.
- [10] K. Hayami, J.-F. Yin and T. Ito, GMRES methods for least squares problems, *NII Technical Reports*, NII-2007-09E (2007), 1-29.