数値計算
大阪大学基礎工学部

永原正章

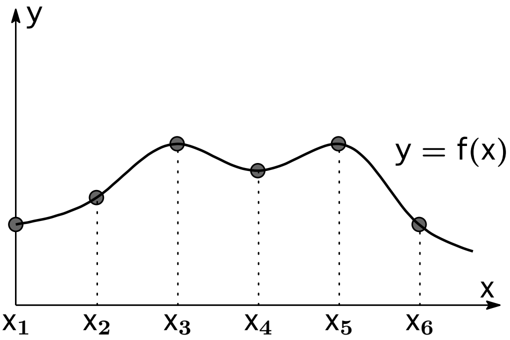
2012年7月19日(5限)

補講・期末試験のお知らせ

- 来週,7月26日(木)は6限目に補講があります.
  - 教室は B102(5限目,6限目)
- 再来週,8月2日(木)は期末試験です.教室は B103 です.
  - 練習問題の類題をいくつか出題しますので, しっかり復習しておいてください.

多項式補間

- Lagrange 補間: N個のデータをすべて通る $N-1$ 次多項式を 簡単に求める方法.
- 多項式補間ですべてうまく行く?



多項式補間の例

- 次のデータが与えられているとする.

x	1	2	3	⋯	18	19
y	2	4	6	⋯	36	38

- これに対する補間多項式は明らかに,$y = 2x$.

多項式補間の例

- 次のデータが与えられているとする.

x	1	2	3	⋯	18	19
y	2	4	6	⋯	36	38

- 何らかの原因で,yに微小なノイズ

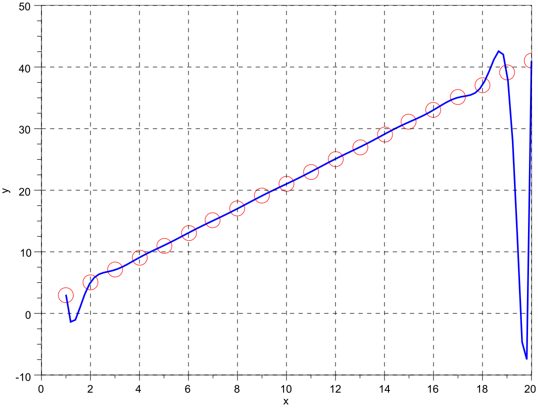
$$\mathbf{0.041, 0.035, 0.069, \ldots, 0.078, 0.012}$$

  が加わったとする.

- これに対する補間多項式を求めると...

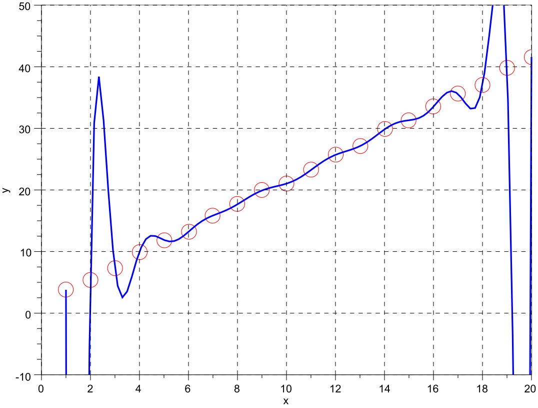
多項式補間の例

- 直線から大きく外れる



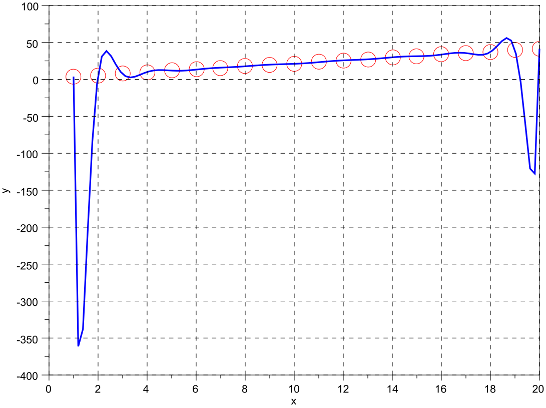
多項式補間の例

- ノイズをさらに10倍してみると...



多項式補間の例

- 曲線は直線から大きく外れている



多項式補間の欠点

- データ点が多いほど,多項式の次数が大きくなり,
  小さなノイズが大きく増幅される
- 与えられたデータにノイズがあるときは,
  その点を必ず通るという要求は意味が無い
- データ点のなるべく近くを通る多項式を求める(回帰)
- データ点と曲線との近さを2乗誤差または2乗ノルムで測り,それを最小化する(最小二乗法)

最小2乗近似問題

- N 組のデータ $\{(x_n, y_n)\}_{n=1}^N$ が与えられたとき，次の2乗誤差(squared error)

$$E = \sum_{n=1}^{N} |y_n - f_M(x_n)|^2.$$

 を最小にする M 次多項式 $f_M(x)$ を求めよ
- 多項式の次数Mはあらかじめ与えられているものとする.

最小2乗近似問題

- 求めるM 次多項式 $f_M(x)$ を

$$f_M(x) = c_0 + c_1 x + \cdots + c_M x^M = \sum_{m=0}^{M} c_m x^m$$

とおく.

- 2乗誤差 E を最小化する係数 c_m $(m = 0, 1, 2, \ldots, M)$ を求める.

最小2乗近似問題

- 多項式

$$f_M(x) = c_0 + c_1 x + \cdots + c_M x^M = \sum_{m=0}^{M} c_m x^m$$

を

$$E = \sum_{n=1}^{N} |y_n - f_M(x_n)|^2.$$

に代入すると...

最小2乗近似問題

次式が得られる.

$$
\begin{aligned}
E &= \sum_{n=1}^{N} |y_n - f_M(x_n)|^2 \\
&= \sum_{n=1}^{N} \left(y_n - \sum_{m=0}^{M} c_m x_n^m \right)^2 \\
&= \sum_{n=1}^{N} y_n^2 - 2 \sum_{n=1}^{N} y_n \sum_{m=0}^{M} c_m x_n^m + \sum_{n=1}^{N} \left(\sum_{m=0}^{M} c_m x_n^m \right)^2
\end{aligned}
$$

最小2乗近似問題

- E を最小化する$c_0, c_1, \ldots, c_M$を求めたい
- 最小値⇒E の $c_0, c_1, \ldots, c_M$による微分が0になる

$$\frac{\partial E}{\partial c_m} = 0, \quad m = 0, 1, 2, \ldots, M$$

- すなわち $m = 0, 1, 2, \ldots, M$に対して

$$\frac{\partial E}{\partial c_m} = -2 \sum_{n=1}^{N} y_n x_n^m + 2 \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=0}^{M} c_k x_n^{m+k} = 0$$

- Eは$c_0, c_1, \ldots, c_M$の2次式⇒ Eの微分は$c_0, c_1, \ldots, c_M$の1次式

最小2乗近似問題

- 線形方程式

$$\sum_{n=1}^{N}\sum_{k=0}^{M} c_k x_n^{m+k} = \sum_{n=1}^{N} y_n x_n^m, \quad m = 0, 1, 2, \ldots, M$$

- ここで

$$\sum_{n=1}^{N} x_n^{m+k} = \alpha_{mk}, \quad \sum_{n=1}^{N} y_n x_n^m = \beta_m, \quad m, k = 0, 1, 2, \ldots, M$$

とおくと

$$\sum_{k=0}^{M} \alpha_{mk} c_k = \beta_m, \quad m = 0, 1, 2, \ldots, M$$

最小2乗近似問題

$$\sum_{k=0}^{M} \alpha_{mk} c_k = \beta_m, \quad m = 0, 1, 2, \ldots, M$$

これを行列形式で書くと

$$\begin{bmatrix} \alpha_{00} & \alpha_{01} & \cdots & \alpha_{0M} \\ \alpha_{10} & \alpha_{11} & \cdots & \alpha_{1M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_{M0} & \alpha_{M1} & \cdots & \alpha_{MM} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_M \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_M \end{bmatrix}$$

この線形方程式を正規方程式(normal equation)と呼ぶ.

最小2乗近似問題 まとめ

- N 組のデータ $\{(x_n, y_n)\}_{n=1}^{N}$ を用いて, 次のα_{mk}とβ_mを定義する.

$$\alpha_{mk} = \sum_{n=1}^{N} x_n^{m+k}, \quad \beta_m = \sum_{n=1}^{N} y_n x_n^m, \quad m, k = 0, 1, 2, \ldots, M$$

- 次の正規方程式を解いて,$c_0, c_1, \ldots, c_M$ を求める.

$$\begin{bmatrix} \alpha_{00} & \alpha_{01} & \cdots & \alpha_{0M} \\ \alpha_{10} & \alpha_{11} & \cdots & \alpha_{1M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_{M0} & \alpha_{M1} & \cdots & \alpha_{MM} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_M \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_M \end{bmatrix}$$

- 最小2乗近似多項式は次式で与えられる.

$$f_M(x) = c_0 + c_1 x + \cdots + c_M x^M = \sum_{m=0}^{M} c_m x^m$$

線形近似⋆⋆⋆

- N 組のデータ $\{(x_n, y_n)\}_{n=1}^{N}$ が与えられたとき,
- これらのデータ点に対する,$M = 1$次の近似多項式,
  すなわち直線を求める(線形近似).

$$f_1(x) = c_0 + c_1 x.$$

線形近似

- α_{mk}とβ_m $(m, k = 0, 1)$を定義する.

$$\alpha_{00} = \sum_{n=1}^{N} x_n^{0+0} = \sum_{n=1}^{N} 1 = N, \qquad \alpha_{01} = \sum_{n=1}^{N} x_n^{0+1} = \sum_{n=1}^{N} x_n,$$

$$\alpha_{10} = \sum_{n=1}^{N} x_n^{1+0} = \sum_{n=1}^{N} x_n = \alpha_{01}, \quad \alpha_{11} = \sum_{n=1}^{N} x_n^{1+1} = \sum_{n=1}^{N} x_n^2,$$

$$\beta_0 = \sum_{n=1}^{N} y_n x_n^0 = \sum_{n=1}^{N} y_n, \quad \beta_1 = \sum_{n=1}^{N} y_n x_n^1 = \sum_{n=1}^{N} y_n x_n.$$

線形近似

- 正規方程式は

$$\begin{bmatrix} \alpha_{00} & \alpha_{01} \\ \alpha_{10} & \alpha_{11} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{bmatrix}.$$

すなわち

$$\begin{bmatrix} N & \sum_n x_n \\ \sum_n x_n & \sum_n x_n^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_n y_n \\ \sum_n y_n x_n \end{bmatrix}.$$

- ただし$\sum_n$ は $\displaystyle\sum_{n=1}^{N}$の意味.

線形近似⋆⋆⋆

- 正規方程式を解くと

$$c_0 = \frac{m_{xx}m_y - m_x m_{xy}}{m_{xx} - m_x^2} = m_y - c_1 m_x \quad (\text{直線の切片}),$$

$$c_1 = \frac{m_{xy} - m_x m_y}{m_{xx} - m_x^2} = \frac{\text{xとyの共分散}}{\text{xの分散}} \quad (\text{直線の傾き}).$$

ただし,

$$m_x := \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} x_n, \quad m_y := \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} y_n,$$

$$m_{xx} := \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} x_n^2, \quad m_{xy} := \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} x_n y_n$$

線形近似 まとめ⋆ ⋆ ⋆

- データ $\{x_n, y_n\}_{n=1}^{N}$ が与えられたとき, これらのデータに対する線形近似直線
$$y = c_0 + c_1 x$$
を求める.
  1. データから各平均値m_x, m_y,m_{xx}, m_{xy}を求める.
  2. 傾き c_1 を共分散と分散の比
$$c_1 = \frac{m_{xy} - m_x m_y}{m_{xx} - m_x^2}$$
により求める.
  3. 直線の式 $y = c_0 + c_1 x$ に $x = m_x$, $y = m_y$ を代入し, c_0 を求める.

例題

- 次のデータについて2乗誤差 E を最小にする関数 $f(x) = be^{ax}$ を求めよ (係数 a と b を求めよ).

x	1	2	3	4
y	7	11	17	27

例題

- 次のデータについて2乗誤差 E を最小にする関数 $f(x) = be^{ax}$ を求めよ（係数 a と b を求めよ）.

x	1	2	3	4
y	7	11	17	27

- 関係式 $y = f(x) = be^{ax}$ より,両辺の対数をとると,

$$\log y = ax + \log b$$

- $z = \log y,\ c = \log b$とおくと

$$z = ax + c$$

例題

- データのyの対数をとって

x	1	2	3	4
$z = \log y$	$\log 7$	$\log 11$	$\log 17$	$\log 27$

- すなわち，

x	1	2	3	4
z	1.946	2.3979	2.8332	3.2958

を近似する直線

$$z = ax + c$$

を求めればよい．

例題

					平均
x	1	2	3	4	2.5
z	1.946	2.3979	2.8332	3.2958	2.6182

- x, z の平均は

$$m_x = \frac{1+2+3+4}{4} = 2.5,$$
$$m_z = \frac{1.946+2.3979+2.8332+3.2958}{4} = 2.6182.$$

例題

					平均
x	1	2	3	4	2.5
z	1.946	2.3979	2.8332	3.2958	2.6182
x^2	1	4	9	16	7.5

- x^2 の平均は

$$m_{xx} = \frac{1^2 + 2^2 + 3^2 + 4^2}{4} = 7.5$$

例題

					平均
x	1	2	3	4	2.5
z	1.946	2.3979	2.8332	3.2958	2.6182
x^2	1	4	9	16	7.5
xz	1.9459	4.7958	8.4996	13.1833	**7.1062**

- x と z の積 xz の平均は

$$\begin{aligned} m_{xz} &= \frac{1 \times 1.946 + 2 \times 2.3979 + 3 \times 2.8332 + 4 \times 3.2958}{4} \\ &= \mathbf{7.1062}. \end{aligned}$$

例題

					平均	分散
x	1	2	3	4	$\mathbf{2.5}$	
z	1.946	2.3979	2.8332	3.2958	$\mathbf{2.6182}$	
x^2	1	4	9	16	$\mathbf{7.5}$	$\mathbf{1.25}$
xz	1.9459	4.7958	8.4996	13.1833	$\mathbf{7.1062}$	$\mathbf{0.5607}$

- 以上より,

$$\mathsf{m_x} = \mathbf{2.5}, \quad \mathsf{m_z} = \mathbf{2.6182}, \quad \mathsf{m_{xx}} = \mathbf{7.5}, \quad \mathsf{m_{xz}} = \mathbf{7.1062}$$

- 分散と共分散は

$$\mathsf{m_{xx}} - \mathsf{m_x^2} = \mathbf{7.5} - \mathbf{2.5}^2 = \mathbf{1.25},$$

$$\mathsf{m_{xz}} - \mathsf{m_x m_y} = \mathbf{7.1062} - \mathbf{2.5} \times \mathbf{2.6182} = \mathbf{0.5607}.$$

例題

					平均	分散
x	1	2	3	4	**2.5**	
z	1.946	2.3979	2.8332	3.2958	**2.6182**	
x^2	1	4	9	16	**7.5**	**1.25**
xz	1.9459	4.7958	8.4996	13.1833	**7.1062**	**0.5607**

- 直線の傾きは

$$a = \frac{\text{共分散}}{\text{分散}} = \frac{\mathbf{0.5607}}{\mathbf{1.25}} = \mathbf{0.4486}.$$

例題

					平均	分散
x	1	2	3	4	$\mathbf{2.5}$	
z	1.946	2.3979	2.8332	3.2958	$\mathbf{2.6182}$	
x^2	1	4	9	16	$\mathbf{7.5}$	$\mathbf{1.25}$
xz	1.9459	4.7958	8.4996	13.1833	$\mathbf{7.1062}$	$\mathbf{0.5607}$

- 直線の傾き$a = \mathbf{0.4486}$
- 直線の式

$$z = ax + c$$

に$x = m_x = \mathbf{2.5}$, $z = m_z = \mathbf{2.6182}$を代入して

$$\mathbf{2.6182} = \mathbf{0.4486} \times \mathbf{2.5} + c, \quad \therefore c = \mathbf{1.4968}$$

例題

- xとzの関係は

$$z = \mathbf{0.4486}x + \mathbf{1.4968}$$

と求まった.

$$z = \log y, \quad c = \log b, \quad \therefore y = e^z, \quad b = e^c$$

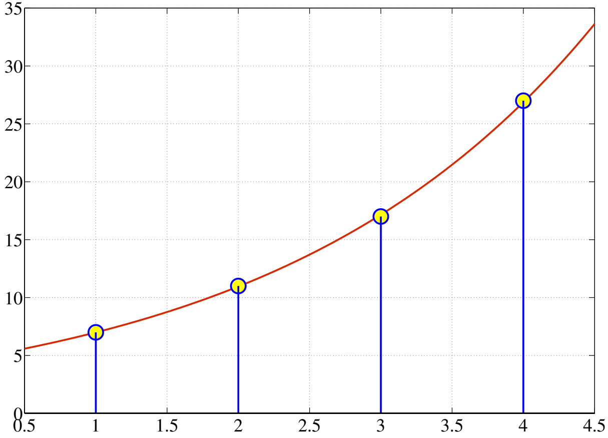
より,もとの関係式は

$$y = e^z = e^{ax+c} = e^c e^{ax} = \mathbf{4.4674}e^{\mathbf{0.4486}x}$$

となる.

例題

データ点と最小2乗近似曲線$y = 4.4674e^{0.4486x}$



練習問題

- 次のデータに対する最小2乗近似直線 $y = ax + b$ を求めよ.

x	0	1	2	3	4
y	1	2	3	3	4

練習問題

- 次のデータに対する最小2乗近似直線 $y = ax + b$ を求めよ.
- ヒント: 次の表の空欄を埋めよ.

						平均	分散
x	0	1	2	3	4		
y	1	2	3	3	4		—
x^2							—
xy							

- 直線の傾き $a =$ 共分散/分散
- 切片bは直線の式 $y = ax + b$ に $x = m_x, y = m_y$ と上で求めたaの値を代入して求める.

解答

						平均	分散
x	0	1	2	3	4		—
y	1	2	3	3	4		—
x^2	0	1	4	9	16		
xy	0	2	6	9	16		

解答

						平均	分散
x	0	1	2	3	4	2	—
y	1	2	3	3	4	2.6	—
x^2	0	1	4	9	16	6	
xy	0	2	6	9	16	6.6	

解答

						平均	分散
x	0	1	2	3	4	2	—
y	1	2	3	3	4	2.6	—
x^2	0	1	4	9	16	6	2
xy	0	2	6	9	16	6.6	1.4

$$\text{分散} = m_{xx} - m_x^2, \quad \text{共分散} = m_{xy} - m_x m_y$$

- 直線の傾きは a =共分散/分散$= 1.4/2 = 0.7$

解答

						平均	分散
x	0	1	2	3	4	2	—
y	1	2	3	3	4	2.6	—
x^2	0	1	4	9	16	6	2
xy	0	2	6	9	16	6.6	1.4

- 直線の傾きは $a =$共分散/分散$= 1.4/2 = 0.7$
- 切片は $m_y = am_x + b$ より

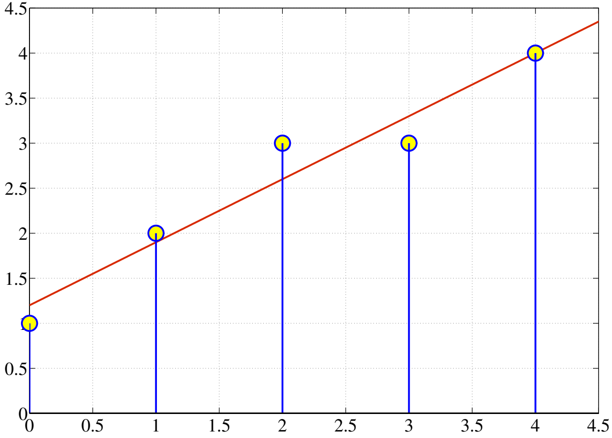
$$b = m_y - am_x = 2.6 - 2 * 0.7 = 1.2$$

- 以上より,直線の方程式は

$$y = 0.7x + 1.2$$

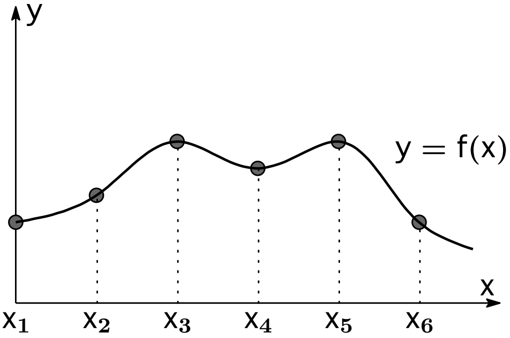
解答

データ点と最小2乗近似直線 y=0.7x+1.2



Lagrange 補間の応用

- Lagrange 補間: N個のデータをすべて通る $N-1$ 次多項式を 簡単に求める方法.
- 複雑な関数の積分値の計算に使うことができる.



数値積分

- 区間 $[a, b]$ 上の可積分関数 f が与えられたとき,

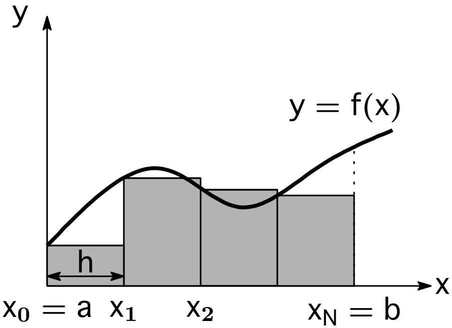
$$I = \int_a^b f(x)dx$$

の値を求めよ.

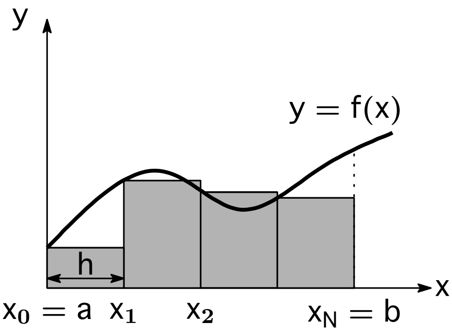
- 積分値Iを厳密に求めることはほとんどの場合,困難.
- 関数 f 積分が簡単な関数で近似し,積分の近似値を求める.
- 積分が簡単な関数=多項式関数

矩形公式

- 積分が簡単な関数=多項式関数
- 一番簡単な関数=0 次多項式(区分的に定数の関数)
- 区間 $[a, b]$ を N 等分し,分割の幅を$h = \frac{b-a}{N}$とおく.



矩形公式

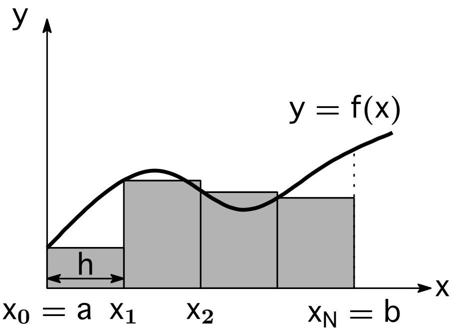


- 区間 $[a, b]$ 上の各分点を

$$x_n = a + n \cdot \frac{b-a}{N} = a + nh, \quad n = 0, 1, 2, \dots, N$$

とおく.

矩形公式



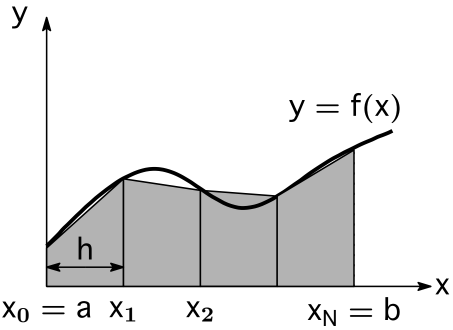
- 矩形公式による積分の近似値:

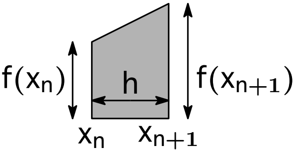
$$I_0 = \sum_{n=0}^{N-1} f(x_n)h = h\sum_{n=0}^{N-1} f(x_n)$$

で与えられる(矩形公式).

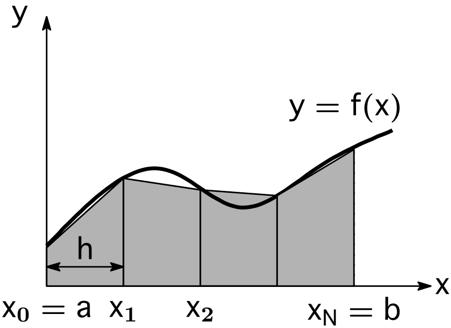
台形公式

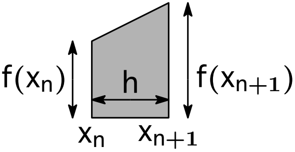
- 区分的 1 次関数で近似





台形公式

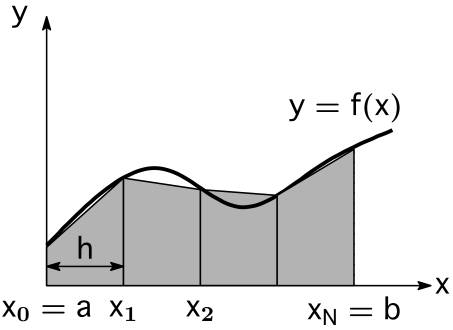


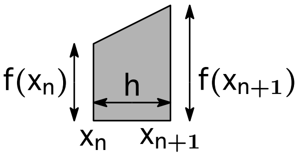


区間[a, b] を N 等分

$$x_n = a + n \cdot \frac{b-a}{N} = a + nh, \quad n = 0, 1, 2, \ldots, N, \quad h = (b-a)/N$$

台形公式

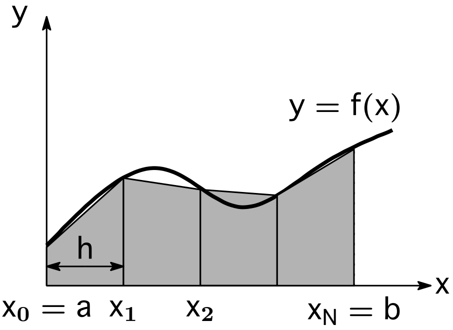


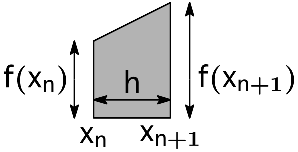


- 面積I =台形の面積の和.各台形の面積を $I_1^{(n)}$ とおくと,

$$I_1^{(n)} = \frac{f(x_n) + f(x_{n+1})}{2}h, \quad n = 0, 1, 2, \ldots, N-1$$

台形公式



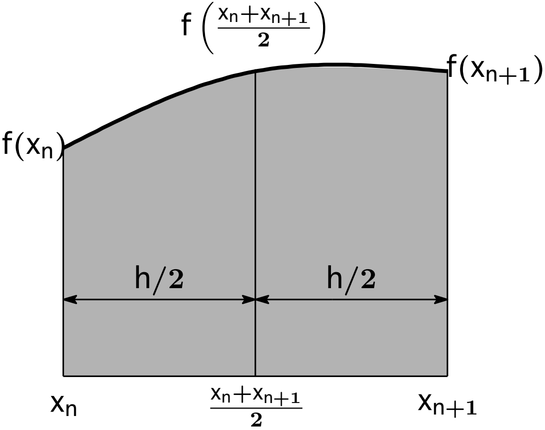


- 台形公式による積分値の近似値I_1:

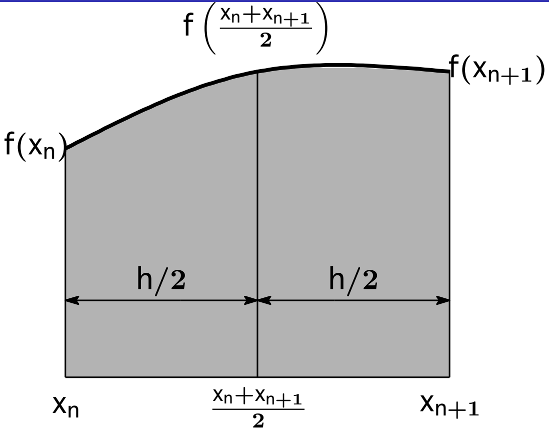
$$I_1 = \sum_{n=0}^{N-1} I_1^{(n)} = \frac{h}{2} \sum_{n=0}^{N-1} \{f(x_n) + f(x_{n+1})\}$$

Simpson の公式

- 関数 f を区分的 2 次関数で近似



Simpsonの公式



- 3点$(x_n, f(x_n)), (M_n, f(M_n)), (x_{n+1}, f(x_{n+1}))$ を通る 2 次関数で区間 $[x_n, x_{n+1}]$ 上の f を近似する

Simpsonの公式

- 各区間でLagrange補間公式により2次多項式を求め,積分を実行する.
- それらを足し合わせると

$$I_2 = \frac{h}{6} \sum_{n=0}^{N-1} \left\{ f(a+nh) + 4f\left(a+nh+\frac{h}{2}\right) + f(a+nh+h) \right\}$$

が得られる(Simpson の公式).