

# 数値解析

---

第8回 関数近似と補間1 ～最小2乗近似～

# 課題

- input.csvにより1行1データの形式で与えられる, 4点のデータを2次多項式( $ax^2 + bx + c$ )で近似し, 関数を示せ. 可能であれば, データと近似関数をグラフで示せ.

(x, y):    (-3.00, -26.3)    (1.00, 2.05)    (1.50, 0.99)    (4.70, -29.0)

# 関数近似

1. エクセルを開く
2. 課題の数値(4つ)を入れる
3. 散布図を描く
4. 近似曲線を追加する

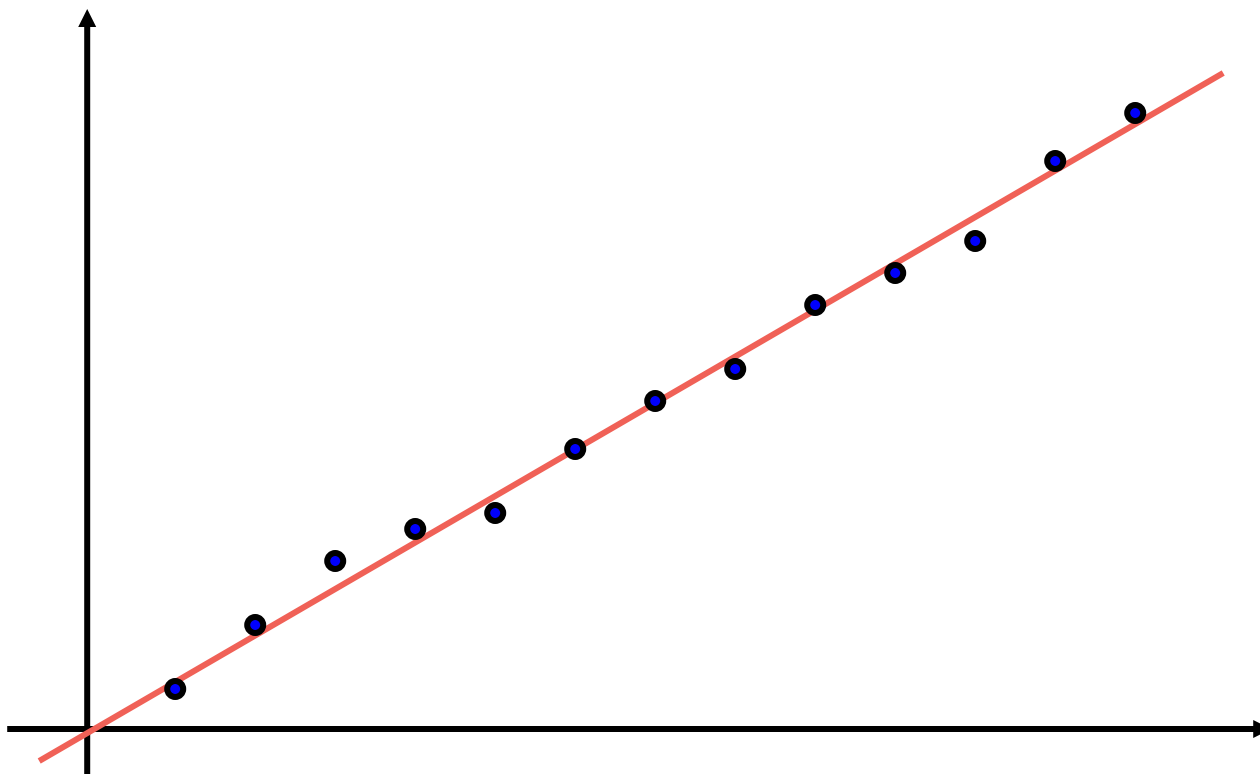
多項式近似: 次数2

# 関数近似

- データや複雑な関数を簡単な関数でおおよそあらわすこと.
- 連続型データ(関数)
  - ex) フーリエ変換: (周期)関数を振動関数の和で表現  
→ 後期の実験(実際には離散フーリエ変換)
- 離散型データ(実験データなど)
  - 数値解析で扱うのはこちら.

# 関数近似(フィッティング)

- 観測データ群に対して、それらのデータの示す傾向を  
**大まか**に知りたい.



# 最小2乗近似

- 観測データ群と関数によって計算される値との差の2-normを最小化するように関数の重みを求める方法.

m個の観測データ  $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_m, y_m)$

$$E = \sum_{k=1}^m \left( y_k - \sum_{j=1}^n a_j \varphi_j(x_k) \right)^2$$

n個の1次独立(線形独立)関数  $\varphi_j$

n個の重み(求めるもの)

# 数学の復習 (1)

- 線形独立 (1次独立)

$$\sum a_j \varphi_j = 0 \quad \text{となるのが, } a_j = 0 \text{ のときのみ}$$

$$\text{ex. } \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ は線形独立だが, } \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ は線形従属}$$

## 関数の独立も同様の考え

多項式  $a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n$  は線形独立

$a_1x + a_2 \cdot 2x$  は線形従属

フーリエ級数は線形独立

# 数学の復習 (2)

- 関数が最小値になる条件: 微分が0

$$\begin{aligned} E &= \sum_{k=1}^m \left( y_k - \sum_{j=1}^n a_j \varphi_j(x_k) \right)^2 \\ &= \sum_{k=1}^m \left( y_k^2 - 2y_k \sum_{j=1}^n a_j \varphi_j(x_k) + \left( \sum_{j=1}^n a_j \varphi_j(x_k) \right)^2 \right) \end{aligned}$$

これを $a$ に関して微分(偏微分)



# 偏微分 (数学の復習続き)

$$E = \sum_{k=1}^m \left( y_k^2 - 2y_k \sum_{j=1}^n a_j \varphi_j(x_k) + \underbrace{\left( \sum_{j=1}^n a_j \varphi_j(x_k) \right)^2}_{\text{合成関数の微分法}} \right)$$


これを $a_i$ に関して微分

合成関数の微分法

$$\frac{\partial E}{\partial a_i} = \sum_{k=1}^m \left( -2y_k \varphi_i(x_k) + 2 \sum_{j=1}^n a_j \varphi_j(x_k) \varphi_i(x_k) \right)$$

$$= -2 \sum_{k=1}^m \left( y_k \varphi_i(x_k) - \sum_{j=1}^n a_j \varphi_j(x_k) \varphi_i(x_k) \right)$$

$$\sum_{k=1}^m y_k \varphi_i(x_k) = \sum_{k=1}^m \sum_{j=1}^n a_j \varphi_j(x_k) \varphi_i(x_k)$$


$$\frac{\partial E}{\partial a_i} = 0$$

# 係数を求める

$$\sum_{k=1}^m y_k \varphi_i(x_k) = \sum_{k=1}^m \sum_{j=1}^n a_j \varphi_j(x_k) \varphi_i(x_k) \quad : a_i \text{ について偏微分したもの}$$

$$\begin{pmatrix} \sum_{k=1}^m y_k \varphi_1(x_k) \\ \sum_{k=1}^m y_k \varphi_2(x_k) \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^m y_k \varphi_n(x_k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^m \varphi_1(x_k) \varphi_1(x_k) & \sum_{k=1}^m \varphi_1(x_k) \varphi_2(x_k) & \cdots & \sum_{k=1}^m \varphi_1(x_k) \varphi_n(x_k) \\ \sum_{k=1}^m \varphi_2(x_k) \varphi_1(x_k) & \sum_{k=1}^m \varphi_2(x_k) \varphi_2(x_k) & \cdots & \sum_{k=1}^m \varphi_2(x_k) \varphi_n(x_k) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{k=1}^m \varphi_n(x_k) \varphi_1(x_k) & \sum_{k=1}^m \varphi_n(x_k) \varphi_2(x_k) & \cdots & \sum_{k=1}^m \varphi_n(x_k) \varphi_n(x_k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

$y = Xa$ の解( $a$ )として係数ベクトルが求まる.

# 多項式近似

$$y = \sum_{j=1}^{n+1} a_{k-1} x^{k-1}$$

次数(n+1)はデータ数m以下  
(一般的には十分小さくとる)

例: 1次(直線) 近似

$(x, y) = (1.0, 5.0), (2.0, 7.1), (3.0, 8.9)$ の3点を考えてみる.

$$y = a_0 + a_1 x$$

$$\varphi_1 = 1$$

$$\varphi_2 = x$$

# 線形近似

左辺値の計算

$$\begin{pmatrix} \sum_{k=1}^m y_k \varphi_1(x_k) \\ \sum_{k=1}^m y_k \varphi_2(x_k) \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^m y_k \varphi_n(x_k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^m \varphi_1(x_k) \varphi_1(x_k) & \sum_{k=1}^m \varphi_1(x_k) \varphi_2(x_k) & \cdots & \sum_{k=1}^m \varphi_1(x_k) \varphi_n(x_k) \\ \sum_{k=1}^m \varphi_2(x_k) \varphi_1(x_k) & \sum_{k=1}^m \varphi_2(x_k) \varphi_2(x_k) & \cdots & \sum_{k=1}^m \varphi_2(x_k) \varphi_n(x_k) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{k=1}^m \varphi_n(x_k) \varphi_1(x_k) & \sum_{k=1}^m \varphi_n(x_k) \varphi_2(x_k) & \cdots & \sum_{k=1}^m \varphi_n(x_k) \varphi_n(x_k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

$\varphi$ は2つなので2行, データ数3点なので $m=3$

$$\begin{aligned} (x, y) = & \\ & (1.0, 5.0), \\ & (2.0, 7.1), \\ & (3.0, 8.9) \\ y = & a_0 + a_1 x \end{aligned}$$

$$\varphi_1 = 1$$

$$\varphi_2 = x$$

$\varphi_1$ は $x$ の値によらず常に1

$$\begin{pmatrix} 5.0 \cdot 1.0 + 7.1 \cdot 1.0 + 8.9 \cdot 1.0 \\ 5.0 \cdot 1.0 + 7.1 \cdot 2.0 + 8.9 \cdot 3.0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 21.0 \\ 45.9 \end{pmatrix}$$

$\varphi_2$ は $x$ の値そのもの

# 線形近似

右辺値の計算

$$\begin{pmatrix} \sum_{k=1}^m y_k \varphi_1(x_k) \\ \sum_{k=1}^m y_k \varphi_2(x_k) \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^m y_k \varphi_n(x_k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^m \varphi_1(x_k) \varphi_1(x_k) & \sum_{k=1}^m \varphi_1(x_k) \varphi_2(x_k) & \cdots & \sum_{k=1}^m \varphi_1(x_k) \varphi_n(x_k) \\ \sum_{k=1}^m \varphi_2(x_k) \varphi_1(x_k) & \sum_{k=1}^m \varphi_2(x_k) \varphi_2(x_k) & \cdots & \sum_{k=1}^m \varphi_2(x_k) \varphi_n(x_k) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{k=1}^m \varphi_n(x_k) \varphi_1(x_k) & \sum_{k=1}^m \varphi_n(x_k) \varphi_2(x_k) & \cdots & \sum_{k=1}^m \varphi_n(x_k) \varphi_n(x_k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

$\varphi$ は2つなので2行2列, データ数3点なので $m=3$

$$\begin{pmatrix} 1.0 \times 1.0 + 1.0 \times 1.0 + 1.0 \times 1.0 & 1.0 \times 1.0 + 1.0 \times 2.0 + 1.0 \times 3.0 \\ 1.0 \times 1.0 + 2.0 \times 1.0 + 3.0 \times 1.0 & 1.0 \times 1.0 + 2.0 \times 2.0 + 3.0 \times 3.0 \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} 3.0 & 6.0 \\ 6.0 & 14.0 \end{pmatrix}$$

対称行列なのでどちらかの計算でOK

$$\begin{aligned} (x, y) = & \\ & (1.0, 5.0), \\ & (2.0, 7.1), \\ & (3.0, 8.9) \\ y = & a_0 + a_1 x \end{aligned}$$

$$\varphi_1 = 1$$

$$\varphi_2 = x$$

# 線形近似

$$\begin{pmatrix} \sum_{k=1}^m y_k \varphi_1(x_k) \\ \sum_{k=1}^m y_k \varphi_2(x_k) \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^m y_k \varphi_n(x_k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^m \varphi_1(x_k) \varphi_1(x_k) & \sum_{k=1}^m \varphi_1(x_k) \varphi_2(x_k) & \cdots & \sum_{k=1}^m \varphi_1(x_k) \varphi_n(x_k) \\ \sum_{k=1}^m \varphi_2(x_k) \varphi_1(x_k) & \sum_{k=1}^m \varphi_2(x_k) \varphi_2(x_k) & \cdots & \sum_{k=1}^m \varphi_2(x_k) \varphi_n(x_k) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{k=1}^m \varphi_n(x_k) \varphi_1(x_k) & \sum_{k=1}^m \varphi_n(x_k) \varphi_2(x_k) & \cdots & \sum_{k=1}^m \varphi_n(x_k) \varphi_n(x_k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 21.0 \\ 45.9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3.0 & 6.0 \\ 6.0 & 14.0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix}$$

ガウスの消去法(部分ピボット選択付)

$$\begin{pmatrix} 6.0 & 14.0 \\ 0.0 & -1.0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 45.9 \\ -1.95 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3.10 \\ 1.95 \end{pmatrix}$$

$$(x, y) =$$

$$(1.0, 5.0),$$

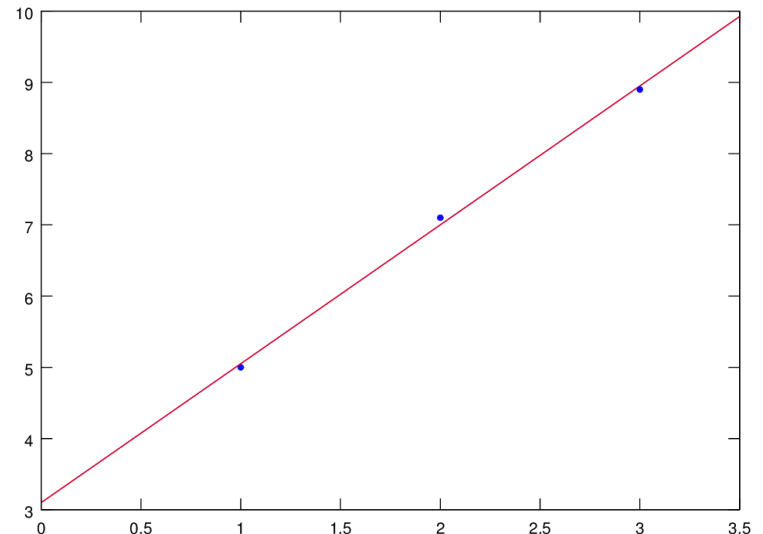
$$(2.0, 7.1),$$

$$(3.0, 8.9)$$

$$y = a_0 + a_1 x$$

$$\varphi_1 = 1$$

$$\varphi_2 = x$$



## 課題 8

- input.csvにより1行1データの形式で与えられる, 4点のデータを2次多項式( $ax^2 + bx + c$ )で近似し, 関数を示せ. 可能であれば, データと近似関数をグラフで示せ.

$(x, y):$      $(-3.00, -26.3)$      $(1.00, 2.05)$      $(1.50, 0.99)$      $(4.70, -29.0)$

手順

1. 各係数を求める
2. ガウスの消去法

$$\varphi_1 = 1$$

$$\varphi_2 = x$$

$$\varphi_3 = x^2$$

# おまけ

- リダイレクトとパイプ

- リダイレクト: 標準入出力をファイルへと切り替える. `>` `<`  
※ 標準エラー出力も変えられます. (標準ストリーム)
- パイプ: プログラム(プロセス)間を直接接続する `|`

パイプを使えば, プログラムの実行結果をgnuplotに渡してグラフが書けます.

```
ex: hogehoge.exe < indata.txt | gnuplot
```

- パイプはプログラム中で直接開くこともできます. (ファイルと同じ)

`popen`, `pclose`関数を使う.  
(VSでは`_popen`, `_pclose`)



# 参考コード(抜粋)

```
FILE *pOut = _popen("gnuplot", "w");// VS以外ではpopen関数
fprintf(pOut, "set zeroaxis¥n");
fprintf(pOut, "set xrange [%f:%f]¥n", A[1][1] -0.5, A[M][1]+0.5);
fprintf(pOut, "plot ");
for (i = N+1; i > 1; i--)
    fprintf(pOut,"%2.2f * x**%d + ", a[i], i-1);
fprintf(pOut,"%2.2f * x**%d¥n", a[i], i-1);

fprintf(pOut, "replot '-' title 'data' ¥n");
for (i = 1; i <= M; i++)
{
    fprintf(pOut,"%f¥t%f¥n", A[i][1], A[i][2]);
}
fprintf(pOut,"e¥n");
fflush(pOut);

printf("press enter key to terminate program¥n");
getchar();
_pclose(pOut);// パイプのクローズ
```