[問題] VII-B

(1) 3 次自然スプライン補間を用いて 3 つのデータ点 $(x_0, y_0) = (0, 1)$, $(x_1, y_1) = (1, 2)$, $(x_2, y_2) = (4, 2)$ を通る 2 本の 3 次の区分的補間多項式 $p_i(x) = y_i + a_i(x - x_i) + b_i(x - x_i)^2 + c_i(x - x_i)^3$, $(i = 0, 1)$ を求めよ。

(2) 3 次自然スプライン補間を用いて 5 つのデータ点 $(x_0, y_0) = (0, 1)$, $(x_1, y_1) = (1, 2)$, $(x_2, y_2) = (4, 2)$, $(x_3, y_3) = (5, 1)$, $(x_4, y_4) = (6, 0)$ を通る 4 本の 3 次の区分的補間多項式 $p_i(x) = y_i + a_i(x - x_i) + b_i(x - x_i)^2 + c_i(x - x_i)^3$, $(i = 0, 1, 2, 3)$ を求めるプログラムを作成し、a_i, b_i, c_i $(i = 0, 1, 2, 3)$ を有効数字 10 進 3 桁で 4 桁目を四捨五入して答えよ。

[略解] VII-B

(1) $P_0(x) = 1 + \frac{9}{8}x - \frac{1}{8}x^3$,

$P_1(x) = 2 + \frac{3}{4}(x-1) - \frac{3}{8}(x-1)^2 + \frac{1}{24}(x-1)^3$

(2)

$$
\begin{aligned}
a_0 &= 1.09, & b_0 &= 0, & c_0 &= -8.96 \times 10^{-2} \\
a_1 &= 0.821, & b_1 &= -0.269, & c_1 &= -1.57 \times 10^{-3} \\
a_2 &= -0.835, & b_2 &= -0.283, & c_2 &= 0.118 \\
a_3 &= -1.05, & b_3 &= 7.08 \times 10^{-2}, & c_3 &= -2.36 \times 10^{-2}
\end{aligned}
$$

3次自然スプライン補間 (Cubic natural spline interpolation)

- **データ点** ($n+1$ 点): $(x_k, y_k) \quad (0 \le k \le n)$
- **3次補間多項式** (n 本)

$$p_i(x) = y_i + a_i(x - x_i) + b_i(x - x_i)^2 + c_i(x - x_i)^3 \quad (0 \le i \le n-2)$$

- **変数** ($3n$ 個): $a_i, b_i, c_i \quad (0 \le i \le n-1)$
- **条件** ($3n$ 本)

$$p_i(x_{i+1}) = y_{i+1} \quad (0 \le i \le n-2) \cdots 1, \ p_{n-1}(x_n) = y_n \cdots 2$$

$$p_0'(x_1) = p_1'(x_1) \cdots 3, \ p_i'(x_{i+1}) = p_{i+1}'(x_{i+1}) \quad (1 \le i \le n-3) \cdots 4$$

$$p_{n-2}'(x_{n-1}) = p_{n-1}'(x_{n-1}) \cdots 5, \ p_i''(x_{i+1}) = p_{i+1}''(x_{i+1}) \quad (0 \le i \le n-2) \cdots 6$$

$$p_0''(x_0) = 0 \cdots 7, \ p_{n-1}''(x_n) = 0 \cdots 8$$

3次自然スプライン補間の計算方法 (1)

- 条件を整理すると**3重対角行列**を係数行列に持つ連立一次方程式を解く問題に帰着できる
  - 乗除算の回数は $\mathcal{O}(n)$ ・必要な配列の大きさも $\mathcal{O}(n)$
- 条件整理の方針
  - $h_i = x_{i+1} - x_i,\ \Delta y_i = y_{i+1} - y_i\ \ (0 \leq i \leq n-1)$ と定義
  - 1, 2, 6, 8 を用いて a_i, c_i を b_i で表し $(0 \leq i \leq n-1)$

    3, 4, 5 に代入して b_i に関する方程式を $n-1$ 本得る
  - 7 より $b_0 = 0$ であり、$u_1 = 0,\ g_0 = 0$ を用いて便宜的に

    $b_0 + u_1 b_1 = g_0 \cdots$ 7$'$ と表す

3次自然スプライン補間の計算方法 (2)

- ⑥, ⑧ より

$$c_i = \frac{b_{i+1} - b_i}{3h_i} \qquad (0 \le i \le n-2)$$

$$c_{n-1} = -\frac{b_{n-1}}{3h_{n-1}}$$

- ①, ②, ⑥, ⑧ より

$$a_i = \frac{\Delta y_i}{h_i} - \frac{1}{3}(2b_i + b_{i+1})h_i \qquad (0 \le i \le n-2)$$

$$a_{n-1} = \frac{\Delta y_{n-1}}{h_{n-1}} - \frac{2}{3}b_{n-1}h_{n-1}$$

3次自然スプライン補間の計算方法 (3)

- ⑦$'$,③,④,⑤ より

$$
\begin{bmatrix}
d_0 & u_1 & & & & \\
\ell_0 & d_1 & u_2 & & & \\
 & \ell_1 & d_2 & u_3 & & \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & & \ell_{n-3} & d_{n-2} & u_{n-1} \\
 & & & & \ell_{n-2} & d_{n-1}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{n-2} \\ b_{n-1} \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} g_0 \\ g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_{n-2} \\ g_{n-1} \end{bmatrix}
$$

ここで $d_i = 1 \ \ (0 \le i \le n-1)$, $u_1 = 0$, $u_i = \frac{h_{i-1}}{2(h_{i-1}+h_{i-2})} \ \ (2 \le i \le n-1)$, $\ell_0 = 0$,
$\ell_i = \frac{h_i}{2(h_{i+1}+h_i)} \ \ (1 \le i \le n-2)$, $g_0 = 0$, $g_i = \frac{3}{2}\frac{\left(\frac{\Delta y_i}{h_i} - \frac{\Delta y_{i-1}}{h_{i-1}}\right)}{h_i + h_{i-1}} \ \ (1 \le i \le n-1)$

[完全スプライン補間の場合 $u_1 = \frac{1}{2}$, $g_0 = \frac{3}{2}(\frac{\Delta y_0}{h_0} - y_0')/h_0$, $l_{n-2} = \frac{1}{2}$, $g_{n-1} = \frac{3}{2}(y_n' - \frac{\Delta y_{n-1}}{h_{n-1}})/h_{n-1}$]

[手法] 3次自然スプライン補間の準備

Preparation for cubic natural spline interpolation

Input: $n,\ x_i,\ y_i\ \ (0 \le i \le n)$

Output: $h_i,\ \varDelta y_i\ \ (0 \le i \le n-1)$

for $i = 0, 1, \ldots, n-1$ **:**

  $h_i \leftarrow x_{i+1} - x_i$

  $\varDelta y_i \leftarrow y_{i+1} - y_i$

[手法] 3 次自然スプライン補間—3 重対角行列の構成

Cubic natural spline interpolation—construction of tridiagonal matrix

Input: $n,\ h_i,\ \Delta y_i \quad (0 \le i \le n-1)$

Output: $d_i,\ g_i \quad (0 \le i \le n-1),\ u_i \quad (1 \le i \le n-1),\ \ell_i \quad (0 \le i \le n-2)$

for $i = 0, 1, \ldots, n-1$ **:**

  $d_i \leftarrow 1$

$g_0 \leftarrow 0$

for $i = 1, 2, \ldots, n-1$ **:**

  $g_i \leftarrow \frac{3}{2} \times \frac{(\Delta y_i/h_i - \Delta y_{i-1}/h_{i-1})}{h_i + h_{i-1}}$

$u_1 \leftarrow 0$

for $i = 2, 3, \cdots, n-1$ **:**

  $u_i \leftarrow \frac{1}{2} \times \frac{h_{i-1}}{h_{i-1} + h_{i-2}}$

$\ell_0 \leftarrow 0$

for $i = 1, 2, \cdots, n-2$ **:**

  $\ell_i \leftarrow \frac{1}{2} \times \frac{h_i}{h_{i+1} + h_i}$

[手法] 連立一次方程式の数値解法–係数行列が 3 重対角の場合

Solution of Tridiagonal Systems

Input: $n,\ d_i,\ g_i\ \ {\scriptstyle (0 \le i \le n-1)},\ u_i\ \ {\scriptstyle (1 \le i \le n-1)},\ \ell_i\ \ {\scriptstyle (0 \le i \le n-2)}$

Output: $b_i\ \ {\scriptstyle (0 \le i \le n-1)}$

for $i = 1, 2, \ldots, n-1$ **:**

$$d_i \leftarrow d_i - u_i \times \left(\frac{\ell_{i-1}}{d_{i-1}}\right)$$

$$g_i \leftarrow g_i - g_{i-1} \times \left(\frac{\ell_{i-1}}{d_{i-1}}\right)$$

$b_{n-1} \leftarrow \frac{g_{n-1}}{d_{n-1}}$

for $i = n-2, n-3, \ldots, 0$ **:**

$$b_i \leftarrow \left(g_i - u_{i+1}\, b_{i+1}\right) / d_i$$

[手法] 3次自然スプライン補間—b_i から a_i, c_i を求める

Cubic natural spline interpolation—calculate a_i and c_i from b_i

Input: $n,\ h_i,\ \Delta y_i,\ b_i \quad {\scriptstyle (0 \le i \le n-1)}$

Output: $a_i,\ c_i \quad {\scriptstyle (0 \le i \le n-1)}$

for $i = 0, 1, \ldots, n-2$ **:**

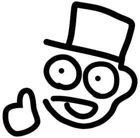
$\qquad a_i \leftarrow \dfrac{\Delta y_i}{h_i} - \dfrac{1}{3} \times (2b_i + b_{i+1})h_i$

$a_{n-1} = \dfrac{\Delta y_{n-1}}{h_{n-1}} - \dfrac{2}{3} \times b_{n-1}h_{n-1}$

for $i = 0, 1, \cdots, n-2$ **:**

$\qquad c_i \leftarrow \frac{b_{i+1} - b_i}{3h_i}$

$c_{n-1} \leftarrow -\dfrac{b_{n-1}}{3h_{n-1}}$



[数値解析 第8回]

最小2乗法

データにフィットする関数を求める

最小2乗法 (Least squares approximation)

- 与えられた m 個のデータ点 (x_i, y_i) $(1 \leq i \leq m)$ に対して関数 $f(x)$ を当てはめる (フィッティングする) 方法
  - 誤差を含むデータに対しても適用可能
- **残差の2乗和** $S = \displaystyle\sum_{i=1}^{m} \{y_i - f(x_i)\}^2$ を用いて当てはまりの良さを評価
  - S が最小となる $f(x)$ を求める
- $f(x)$ として n 次多項式 $p_n(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n$ $(m > n)$ を用いる場合 **線形最小2乗法**[1] と呼ぶ

[1] 「線形」は多項式の係数に対して使われており $f(x)$ に対して使われているわけではないことに注意

線形最小2乗法 (Linear least squares approximation)

- S が最小となる時 $a_0, a_1, \ldots, a_n$ の偏微分が 0 となる事を用いて**正規方程式** (normal equation) を構成する
  - $$\frac{\partial S}{\partial a_0} = \frac{\partial S}{\partial a_1} = \cdots = \frac{\partial S}{\partial a_n} = 0$$
- **正規方程式** $(X^\top X)\boldsymbol{a} = X^\top \boldsymbol{y}$ を $\boldsymbol{a}$ について解けばよい
  - ここで $X = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & \cdots & x_1^n \\ 1 & x_2 & \cdots & x_2^n \\ 1 & x_3 & \cdots & x_3^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_m & \cdots & x_m^n \end{bmatrix}$, $\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}$, $\boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}$ とおいた

[問題] VIII-A (1)

m 個 $(m>2)$ のデータ点 (x_i, y_i) $(1 \leq i \leq m)$ に対し最小2乗法を用いて多項式 $p_1(x) = a_0 + a_1 x$ を当てはめる場合の正規方程式を導出せよ。また求めた正規方程式は

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_m \end{bmatrix}, \boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix}, \boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}$$

を用いて $(X^\top X)\boldsymbol{a} = X^\top \boldsymbol{y}$ と表せる事を示せ。

[問題] VIII-A (2)

問 1 で求めた正規方程式を $\boldsymbol{a}$ について解く事で a_1 を s_x^2, s_{xy} を用いて、a_0 を $a_1, \bar{x}, \bar{y}$ を用いて表せ。ここで s_x^2 は x_i の分散、s_{xy} は x_i と y_i の共分散、 $\bar{x}$ は x_i の平均値、$\bar{y}$ は y_i の平均値を表す。

[問題] VIII-A (3)

問 2 で求めた式を用いて以下の表にある 8 つのデータ点の残差の 2 乗和を最小化する a_0, a_1 および残差の 2 乗和の最小値を求めるプログラムを作成せよ。これらの数値は有効数字 4 桁で 5 桁目を四捨五入して答えよ。作成したプログラムも提出すること。プログラミング言語は問わない。

x	0	1	1	2	2	3	5	6
y	1	2	3	15	15	33	75	146

[略解] VIII-A (1)

$\frac{\partial S}{\partial a_0} = \frac{\partial S}{\partial a_1} = 0$ より正規方程式は以下のように表せる。

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^m 1 & \sum_{i=1}^m x_i \\ \sum_{i=1}^m x_i & \sum_{i=1}^m x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^m y_i \\ \sum_{i=1}^m x_i y_i \end{bmatrix}$$

これは確かに $(X^\top X)\boldsymbol{a} = X^\top \boldsymbol{y}$ と等しい。

[略解] Ⅷ-A (2)

$$a_0 = \frac{m\left(\sum_{i=1}^{m} x_i y_i\right) - \left(\sum_{i=1}^{m} x_i\right)\left(\sum_{i=1}^{m} y_i\right)}{m\left(\sum_{i=1}^{m} x_i^2\right) - \left(\sum_{i=1}^{m} x_i\right)^2} = \frac{s_{xy}}{s_x^2}$$

$$a_1 = \bar{y} - a_0 \bar{x}$$

[略解] VIII-A (3)

$$a_0 = -21.25$$
$$a_1 = 23.00$$

残差の2乗和の最小値 2.112×10^3

[補足] 重み付き最小２乗法 (Weighted least squares approximation)

- データ点の各点で誤差の分散 σ_i^2 が分かっている場合、残差の２乗和に**重み**を付けた最小２乗法が用いられる
  - $S = \sum_{i=1}^{m} \frac{\{y_i - f(x_i)\}^2}{\sigma_i^2}$

[問題] VIII-B

(1) VIII-A の問 3 にある 8 つのデータ点を最小 2 乗法を用いて 3 次多項式 $p_3(x)$ を当てはめる問題を考える。正規方程式を LU 分解で解くプログラムを作成し $p_3(x)$ の係数を有効数字 4 桁で 5 桁目を四捨五入して求めよ。作成したプログラムも提出すること。プログラミング言語は問わない。

(2) 問 1 の正規方程式をハウスホルダー法を用いて QR 分解してから解くプログラムを作成し $p_3(x)$ の係数を有効数字 4 桁で 5 桁目を四捨五入して求めよ。作成したプログラムも提出すること。プログラミング言語は問わない。