数値解析 レポート No. 8

学籍番号 ______________ 氏名 ______________

[〆切] 2020/11/27 19:00

[VII. 関数近似と補間 (2)]

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。

(1) 3次自然スプライン補間の条件 $(n=2)$ より

$P_0(x_1) = y_1$ …①, $P_1(x_2) = y_2$ …②, $P_0'(x_1) = P_1'(x_1)$ …③, $P_0''(x_1) = P_1''(x_1)$ …⑥

$P_0''(x_0) = 0$ …⑦, $P_1''(x_2) = 0$ …⑧

また隣り合うデータ点のx座標の差 h_0, h_1 とy座標の差 $\Delta y_0, \Delta y_1$ を計算すると

$h_0 = x_1 - x_0 =$, $h_1 = x_2 - x_1 =$

$\Delta y_0 = y_1 - y_0 =$, $\Delta y_1 = y_2 - y_1 =$

となる。⑦より $b_0 =$

⑥より $2b_0 + 6c_0 h_0 = 2b_1 \iff c_0 = \dfrac{b_1 - b_0}{3h_0} = \dfrac{b_1}{3h_0} =$

⑧より $2b_1 + 6c_1 h_1 = 0 \iff c_1 = -\dfrac{b_1}{3h_1} =$

①より

$$a_0 h_0 + b_0 h_0^2 + c_0 h_0^3 = \Delta y_0$$

$$\iff a_0 h_0 + \frac{1}{3} b_1 h_0 = \Delta y_0$$

$$\iff a_0 = \frac{\Delta y_0}{h_0} - \frac{1}{3} b_1 h_0 =$$

②より

$$a_1 h_1 + b_1 h_1^2 + c_1 h_1^3 = \Delta y_1$$

$$\iff a_1 h_1 + b_1 h_1^2 - \frac{1}{3} b_1 h_1^2 = \Delta y_1$$

$$\iff a_1 = \frac{\Delta y_1}{h_1} - \frac{2}{3} b_1 h_1 =$$

③ より

$$a_0 + 2b_0 h_0 + 3c_0 h_0^2 = a_1$$

$$\Leftrightarrow \frac{\Delta y_0}{h_0} - \frac{1}{3} b_1 h_0 + b_1 h_0 = \frac{\Delta y_1}{h_1} - \frac{2}{3} b_1 h_1$$

$$\Leftrightarrow \frac{2}{3} b_1 (h_1 + h_0) = \frac{\Delta y_1}{h_1} - \frac{\Delta y_0}{h_0}$$

$$\Leftrightarrow b_1 = \frac{3}{2} \frac{\left(\frac{\Delta y_1}{h_1} - \frac{\Delta y_0}{h_0}\right)}{h_1 + h_0} =$$

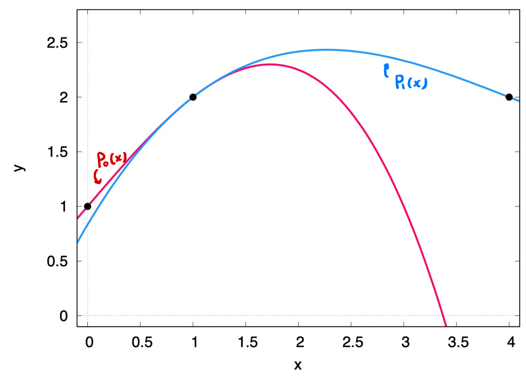
$\boxed{\text{授業スライド p.6 との対応}}$

$$A = [1], \quad \mathbb{b} = [b_1], \quad \mathbb{g} = [g_1]$$

$$A\mathbb{b} = \mathbb{g}$$

$$\Leftrightarrow b_1 = g_1 = \frac{3}{2} \frac{\left(\frac{\Delta y_1}{h_1} - \frac{\Delta y_0}{h_0}\right)}{h_1 + h_0} = \frac{3}{2} \times \left(-\frac{1}{4}\right) = -\frac{3}{8}$$

$$\begin{cases} a_0 = 1 - \frac{1}{3} b_1 = \\ a_1 = -2 b_1 = \end{cases} \qquad \begin{cases} c_0 = \frac{1}{3} b_1 = \\ c_1 = -\frac{1}{9} b_1 = \end{cases}$$



$$\begin{cases} P_0(x) = 1 + \frac{9}{8} x - \frac{1}{8} x^3 \\ P_1(x) = 2 + \frac{3}{4}(x-1) - \frac{3}{8}(x-1)^2 + \frac{1}{24}(x-1)^3 \end{cases}$$ //

(2)

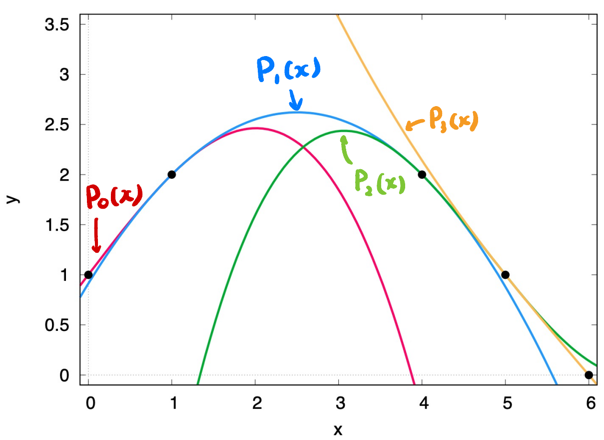
```
# Preparation

for i in range(n):
    h[i] = x[i+1] - x[i]
    dy[i] = y[i+1] - y[i]
```

```
# Constraction of tridiagnal matrix

for i in range(n):
    d[i] = 1

u[1] = 0
for i in range(2, n):
    u[i] = (1./2) * h[i-1]/(h[i-1] + h[i-2])
print("u", u)

l[0] = 0
for i in range(1,n-1):
    l[i] = (1./2) * h[i]/(h[i+1] + h[i])
print("l", l)

g[0] = 0
for i in range(1, n):
    g[i] = (3./2) * (dy[i]/h[i] - dy[i-1]/h[i-1]) / (h[i]+h[i-1])
```

```
# Solve tridiagonal systems

for i in range(1, n):
    d[i] = d[i] - u[i] * l[i-1] / d[i-1]
    g[i] = g[i] - g[i-1] * l[i-1] / d[i-1]

b[n-1] = g[n-1] / d[n-1]

for i in reversed(range(1,n-1)):
    b[i] = (g[i] - u[i+1] * b[i+1])/d[i]
```

```
# Calculate c[i] and a[i] from b[i]

for i in range(n-1):
    a[i] = dy[i]/h[i] - (1./3) * (2*b[i] + b[i+1]) * h[i]
    c[i] = (1./3) * (b[i+1]-b[i])/ h[i]
a[n-1] = dy[n-1]/h[n-1] - (2./3) * b[n-1] * h[n-1]
c[n-1] =  - (1./3) * b[n-1] / h[n-1]
```

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



$\boxed{\text{キーフレーズ}}$

$A\mathbb{x} = \mathbb{b}$ の A が3重対角なら

$\mathbb{x}$ は $O(n)$ で求まる.

◎ 3次スプライン補間の補間多項式の求め方

- データ点 n+1 点、補間多項式 n 本, 決定すべき係数 3n

$$P_i(x) = y_i + a_i(x-x_i) + b_i(x-x_i)^2 + c_i(x-x_i)^3 \quad (0 \le i \le n-1)$$

$$P_i'(x) = a_i + 2b_i(x-x_i) + 3c_i(x-x_i)^2 \quad (0 \le i \le n-1)$$

$$P_i''(x) = 2b_i + 6c_i(x-x_i) \quad (0 \le i \le n-1)$$

$$\begin{cases} P_i(x_{i+1}) = y_{i+1} \ (0 \le i \le n-2) \cdots ①, \quad P_{n-1}(x_n) = y_n \cdots ② \\ P_0'(x_1) = P_1'(x_1) \cdots ③, \quad P_i'(x_{i+1}) = P_{i+1}'(x_{i+1}) \ (1 \le i \le n-3) \cdots ④ \quad P_{n-2}'(x_{n-1}) = P_{n-1}'(x_{n-1}) \cdots ⑤ \\ P_i''(x_{i+1}) = P_{i+1}''(x_{i+1}) \ (0 \le i \le n-2) \cdots ⑥, \quad P_0''(x_0) = 0 \cdots ⑦, \quad P_{n-1}''(x_n) = 0 \cdots ⑧ \end{cases}$$

$$h_i = x_{i+1} - x_i \quad (0 \le i \le n-1)$$

$$\Delta y_i = y_{i+1} - y_i \quad (0 \le i \le n-1)$$

- ⑦より

$$2b_0 = 0 \quad \therefore b_0 = 0$$

ここで得られた b_0 を $u_1 = 0$, $g_0 = 0$ を用いて便宜的に

$$b_0 + u_1 b_1 = g_0 \cdots ⑦'$$

と表す. (こうすると他の端条件の時と表記をそろえることができる)

- ⑥より

$$2b_i + 6c_i(x_{i+1} - x_i) = 2b_{i+1}$$

$$\Leftrightarrow 6c_i h_i = 2(b_{i+1} - b_i)$$

$$\Leftrightarrow c_i = \frac{b_{i+1} - b_i}{3h_i} \quad (0 \le i \le n-2) \cdots ⑥'$$

- ⑧より

$$2b_{n-1} + 6c_{n-1}(x_n - x_{n-1}) = 0$$

$$\Leftrightarrow 2b_{n-1} + 6c_{n-1}h_{n-1} = 0$$

$$\Leftrightarrow c_{n-1} = -\frac{b_{n-1}}{3h_{n-1}} \cdots ⑧'$$

・① より

$$y_i + a_i(x_{i+1} - x_i) + b_i(x_{i+1} - x_i)^2 + c_i(x_{i+1} - x_i)^3 = y_{i+1}$$

$$\Leftrightarrow a_i h_i + b_i h_i^2 + c_i h_i^3 = \Delta y_i$$

$$\Leftrightarrow a_i h_i + b_i h_i^2 + \frac{1}{3}(b_{i+1} - b_i) h_i^2 = \Delta y_i \quad (\because ⑥')$$

$$\Leftrightarrow a_i h_i + \frac{1}{3}(2b_i + b_{i+1}) h_i^2 = \Delta y_i$$

$$\Leftrightarrow a_i = \frac{\Delta y_i}{h_i} - \frac{1}{3}(2b_i + b_{i+1}) h_i \quad (0 \leq i \leq n-2) \cdots ①'$$

・② より

$$y_{n-1} + a_{n-1}(x_n - x_{n-1}) + b_{n-1}(x_n - x_{n-1})^2 + c_{n-1}(x_n - x_{n-1})^2 = y_n$$

$$\Leftrightarrow a_i h_i + b_i h_i^2 + c_i h_i^3 = \Delta y_i$$

$$\Leftrightarrow a_{n-1} h_{n-1} + b_{n-1} h_{n-1}^2 + c_{n-1} h_{n-1}^3 = \Delta y_{n-1}$$

$$\Leftrightarrow a_{n-1} h_{n-1} + b_{n-1} h_{n-1}^2 - \frac{1}{3} b_{n-1} h_{n-1}^2 = \Delta y_{n-1} \quad (\because ⑥')$$

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

・③ より

$$a_0 + 2b_0(x_1 - x_0) + 3c_0(x_1 - x_0)^2 = a_1$$

$$\Leftrightarrow a_0 + 2b_0 h_0 + 3c_0 h_0^2 = a_1$$

$$\Leftrightarrow \frac{\Delta y_0}{h_0} - \frac{1}{3}(2b_0 + b_1) h_0 + 2b_0 h_0 + (b_1 - b_0) h_0 = \frac{\Delta y_1}{h_1} - \frac{1}{3}(2b_1 + b_2) h_1 \quad (\because ①', ⑥')$$

$$\Leftrightarrow \frac{2}{3} b_1 (h_1 + h_0) + \frac{1}{3} b_2 h_1 = \frac{\Delta y_1}{h_1} - \frac{\Delta y_0}{h_0}$$

$$\Leftrightarrow b_1 + \frac{h_1}{2(h_1 + h_0)} b_2 = \frac{3}{2} \frac{\left(\frac{\Delta y_1}{h_1} - \frac{\Delta y_0}{h_0}\right)}{h_1 + h_0}$$

$$\Leftrightarrow b_1 + u_2 b_2 = g_1$$

ここで

$$u_2 = \frac{h_1}{2(h_1 + h_0)}, \quad g_1 = \frac{3}{2} \frac{\left(\frac{\Delta y_1}{h_1} - \frac{\Delta y_0}{h_0}\right)}{h_1 + h_0}$$

とおいた。また便宜的に $l_0 = 0$ とおいて式を変形すると

$$l_0 b_0 + b_1 + u_2 b_2 = g_1 \cdots ③'$$

と表せる。

・④より

$$a_i + 2b_i(x_{i+1} - x_i) + 3c_i(x_{i+1} - x_i)^2 = a_{i+1}$$

$$\Leftrightarrow a_i + 2b_i h_i + 3c_i h_i^2 = a_{i+1}$$

$$\Leftrightarrow \frac{\Delta y_i}{h_i} - \frac{1}{3}(2b_i + b_{i+1})h_i + 2b_i h_i + (b_{i+1} - b_i)h_i = \frac{\Delta y_{i+1}}{h_{i+1}} - \frac{1}{3}(2b_{i+1} + b_{i+2})h_{i+1} \quad (\because ①', ⑤')$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{3}b_i h_i + \frac{2}{3}b_{i+1}(h_{i+1} + h_i) + \frac{1}{3}b_{i+2}h_{i+1} = \frac{\Delta y_{i+1}}{h_{i+1}} - \frac{\Delta y_i}{h_i}$$

$$\Leftrightarrow \frac{h_i}{2(h_{i+1} + h_i)}b_i + b_{i+1} + \frac{h_{i+1}}{2(h_{i+1} + h_i)}b_{i+2} = \frac{3}{2}\frac{\left(\frac{\Delta y_{i+1}}{h_{i+1}} - \frac{\Delta y_i}{h_i}\right)}{h_{i+1} + h_i}$$

$$\Leftrightarrow l_i b_i + b_{i+1} + u_{i+2}b_{i+2} = g_{i+1} \quad (1 \leq i \leq n-3) \cdots ④'$$

ここで

$$l_i = \frac{h_i}{2(h_{i+1} + h_i)}, \quad u_{i+2} = \frac{h_{i+1}}{2(h_{i+1} + h_i)}, \quad g_{i+1} = \frac{3}{2}\frac{\left(\frac{\Delta y_{i+1}}{h_{i+1}} - \frac{\Delta y_i}{h_i}\right)}{h_{i+1} + h_i} \quad (1 \leq i \leq n-3)$$

とおいた。

・⑤のとき

$$a_{n-2} + 2b_{n-2}(x_{n-1} - x_{n-2}) + 3c_{n-2}(x_{n-1} - x_{n-2})^2 = a_{n-1}$$

$$\Leftrightarrow a_{n-2} + 2b_{n-2}h_{n-2} + 3c_{n-2}h_{n-2}^2 = a_{n-1}$$

$$\Leftrightarrow \frac{\Delta y_{n-2}}{h_{n-2}} - \frac{1}{3}(2b_{n-2} + b_{n-1})h_{n-2} + 2b_{n-2}h_{n-2} + (b_{n-1} - b_{n-2})h_{n-2} = \frac{\Delta y_{n-1}}{h_{n-1}} - \frac{2}{3}b_{n-1}h_{n-1}$$

$$(\because ①', ②', ⑧')$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{3}b_{n-2}h_{n-2} + \frac{2}{3}b_{n-1}(h_{n-1} + h_{n-2}) = \frac{\Delta y_{n-1}}{h_{n-1}} - \frac{\Delta y_{n-2}}{h_{n-2}}$$

$$\Leftrightarrow \frac{h_{n-2}}{2(h_{n-1} + h_{n-2})}b_{n-2} + b_{n-1} = \frac{3}{2}\frac{\left(\frac{\Delta y_{n-1}}{h_{n-1}} - \frac{\Delta y_{n-2}}{h_{n-2}}\right)}{h_{n-1} + h_{n-2}}$$

$$\Leftrightarrow l_{n-2}b_{n-2} + b_{n-1} = g_{n-1} \cdots ⑤'$$

ここで

$$l_{n-2} = \frac{h_{n-2}}{2(h_{n-1} + h_{n-2})}, \quad g_{n-1} = \frac{3}{2}\frac{\left(\frac{\Delta y_{n-1}}{h_{n-1}} - \frac{\Delta y_{n-2}}{h_{n-2}}\right)}{h_{n-1} + h_{n-2}}$$

とおいた。

$$
\begin{bmatrix}
1 & u_1 & & & & \\
l_0 & 1 & u_2 & & & \\
 & l_1 & 1 & u_3 & & \\
 & & & \ddots & & \\
 & & & l_{n-3} & 1 & u_{n-1} \\
 & & & & l_{n-2} & 1
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{n-2} \\ b_{n-1}
\end{bmatrix}
=
\begin{array}{c l}
\begin{bmatrix}
g_0 \\ g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_{n-2} \\ g_{n-1}
\end{bmatrix}
&
\begin{array}{l}
\cdots ⑦' \\ \cdots ③' \\ \left.\begin{array}{l} \\ \\ \\ \end{array}\right\} \cdots ④' \\ \cdots ⑤'
\end{array}
\end{array}
$$

$$
\begin{cases}
u_1 = 0, \quad u_i = \dfrac{h_{i-1}}{2(h_{i-1} + h_{i-2})} & (2 \leq i \leq n-1) \\[2ex]
l_0 = 0, \quad l_i = \dfrac{h_i}{2(h_{i+1} + h_i)} & (1 \leq i \leq n-2) \\[2ex]
g_0 = 0, \quad g_i = \dfrac{3}{2} \dfrac{\left(\dfrac{\Delta y_i}{h_i} - \dfrac{\Delta y_{i-1}}{h_{i-1}} \right)}{h_i + h_{i-1}} & (1 \leq i \leq n-1)
\end{cases}
$$

数値解析 レポート No. 8　　学籍番号　　氏名

[〆切] 2020/11/27 19:00

[VIII. 最小 2 乗法]

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

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

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

(2) 問 1 で求めた正規方程式を $\boldsymbol{a}$ について解く事で a_0 を s_x^2, s_{xy} を用いて、a_1 を $a_0, \bar{x}, \bar{y}$ 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。

(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

(1) 残差の 2 乗和 S は

$$S = \sum_{i=1}^{m} \{y_i - (a_0 + a_1 x_i)\}^2$$

と表され、S が最小となる a_0, a_1 で

$\cdots$①,　　　　$\cdots$②

となる。① より

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = -2\sum_{i=1}^{m} \{y_i - (a_0 + a_1 x_i)\} = 0$$

$$\Leftrightarrow \begin{bmatrix} \quad , \quad \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \qquad \cdots ①'$$

であり、また ② より

$$\frac{\partial S}{\partial a_1} = -2\sum_{i=1}^{m} \{y_i - (a_0 + a_1 x_i)\} x_i = 0$$

$$\Leftrightarrow \begin{bmatrix} \quad , \quad \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \qquad \cdots ②'$$

キーワード

正規方程式

①', ②' より

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

//

また

$$X^T X = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_1 & x_2 & \cdots & x_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} 1 & \sum_{i=1}^{m} x_i \\ \sum_{i=1}^{m} x_i & \sum_{i=1}^{m} x_i^2 \end{bmatrix}$$

$$X^T \mathbb{y} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_1 & x_2 & \cdots & x_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} y_i \\ \sum_{i=1}^{m} x_i y_i \end{bmatrix}$$

であるから $(X^T X)\mathbb{a} = X^T \mathbb{y}$ と表せることが示された。

(2) 行列 $A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$ に対して $\det A = ad - bc \neq 0$ のとき

逆行列が存在して $A^{-1} = \frac{1}{\det A}\begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}$ と表せる。

従って $\det(X^T X) \neq 0$ のとき

$$\mathbb{a} = \underbrace{(X^T X)^{-1} X^T}_{} \mathbb{y} \quad \cdots ③$$

疑似逆行列 (pseudo-inverse matrix)

または ムーア・ペンローズの一般化逆行列 (Moore-Penrose generalized inverse) と呼ばれる

ここで $\bar{x} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} x_i$, $\bar{y} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} y_i$ であり また

$$s_x^2 = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(x_i - \bar{x})^2 = \frac{1}{m}\left(\sum_{i=1}^{m} x_i^2\right) - 2\underbrace{\frac{1}{m}\left(\sum_{i=1}^{m} x_i\right)}_{\bar{x}}\bar{x} + \bar{x}^2 = \frac{1}{m}\left(\sum_{i=1}^{m} x_i^2\right) - \bar{x}^2$$

$$\iff \sum_{i=1}^{m} x_i^2 = m(s_x^2 + \bar{x}^2)$$

$$s_{xy} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = \frac{1}{m}\left(\sum_{i=1}^{m} x_i y_i\right) - \underbrace{\frac{1}{m}\left(\sum_{i=1}^{m} x_i\right)}_{\bar{x}}\bar{y} - \bar{x}\underbrace{\frac{1}{m}\left(\sum_{i=1}^{m} y_i\right)}_{\bar{y}} + \bar{x}\bar{y}$$

$$= \frac{1}{m}\left(\sum_{i=1}^{m} x_i y_i\right) - \bar{x}\bar{y}$$

$$\iff \sum_{i=1}^{m} x_i y_i = m(s_{xy} + \bar{x}\bar{y})$$

X^TX, X^Ty の要素を書き換えると

$$X^TX = \begin{bmatrix} m & m\bar{x} \\ m\bar{x} & m(S_x^2+\bar{x}^2) \end{bmatrix} = m\begin{bmatrix} 1 & \bar{x} \\ \bar{x} & S_x^2+\bar{x}^2 \end{bmatrix}$$

$$\therefore \det(X^TX) = m^2(S_x^2+\bar{x}^2) - m^2\bar{x}^2 = m^2 S_x^2$$

$$X^Ty = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} y_i \\ \sum_{i=1}^{m} x_i y_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m\bar{y} \\ m(S_{xy}+\bar{x}\bar{y}) \end{bmatrix} = m\begin{bmatrix} \bar{y} \\ S_{xy}+\bar{x}\bar{y} \end{bmatrix}$$

となる。従って ③ は

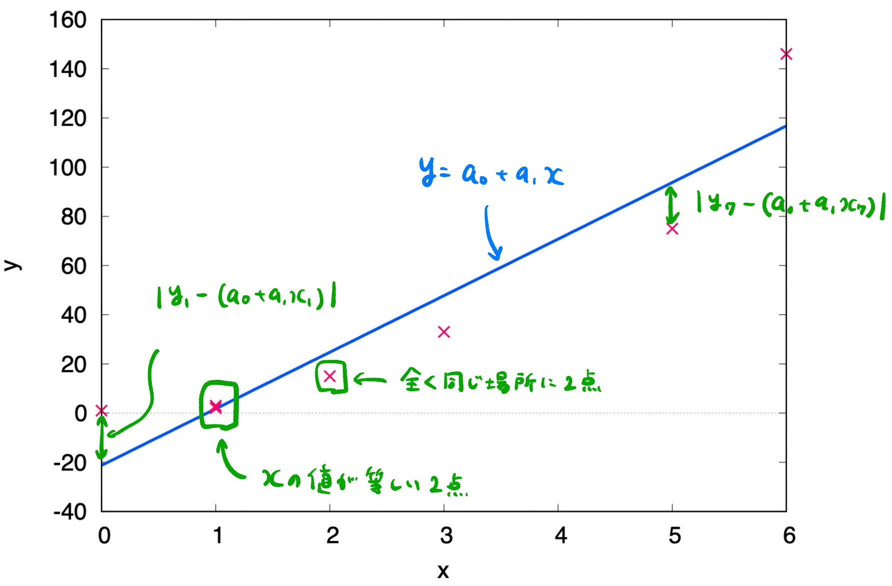
$$a = \frac{1}{S_x^2}\begin{bmatrix} S_x^2+\bar{x}^2 & -\bar{x} \\ -\bar{x} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \bar{y} \\ S_{xy}+\bar{x}\bar{y} \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{S_x^2}\begin{bmatrix} (S_x^2+\cancel{\bar{x}^2})\bar{y} - \bar{x}(S_{xy}+\cancel{\bar{x}\bar{y}}) \\ S_{xy}+\cancel{\bar{x}\bar{y}} - \cancel{\bar{x}\bar{y}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{y} - \frac{S_{xy}}{S_x^2}\bar{x} \\ \frac{S_{xy}}{S_x^2} \end{bmatrix}$$

従って $a_1 = \dfrac{S_{xy}}{S_x^2}$, $a_0 = \bar{y} - \dfrac{S_{xy}}{S_x^2}\bar{x} = \bar{y} - a_1\bar{x}$ //

(3)

$a_0 = -21.25$
$a_1 = 23.00$
残差の2乗和の最小値 2.112×10^3



数値解析 レポート No. 8　　学籍番号　　氏名

[〆切] 2020/11/27 19:00

[VII. 関数近似と補間 (2)]

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。

(1) 3次自然スプライン補間の条件 (n=2) より

$P_0(x_1) = y_1 \cdots ①$, $P_1(x_2) = y_2 \cdots ②$, $P_0'(x_1) = P_1'(x_1) \cdots ③$, $P_0''(x_1) = P_1''(x_1) \cdots ⑥$

$P_0''(x_0) = 0 \cdots ⑦$, $P_1''(x_2) = 0 \cdots ⑧$

また隣り合うデータ点のx座標の差 h_0, h_1 とy座標の差 $\Delta y_0, \Delta y_1$ を計算すると

$$h_0 = x_1 - x_0 = 1, \quad h_1 = x_2 - x_1 = 4 - 1 = 3$$

$$\Delta y_0 = y_1 - y_0 = 2 - 1 = 1, \quad \Delta y_1 = y_2 - y_1 = 2 - 2 = 0$$

となる。⑦より $b_0 = 0$

⑥より $2b_0 + 6c_0h_0 = 2b_1 \iff c_0 = \dfrac{b_1 - b_0}{3h_0} = \dfrac{b_1}{3h_0} = \dfrac{1}{3}b_1$

⑧より $2b_1 + 6c_1h_1 = 0 \iff c_1 = -\dfrac{b_1}{3h_1} = -\dfrac{1}{9}b_1$

①より

$$a_0h_0 + b_0h_0^2 + c_0h_0^3 = \Delta y_0$$

$$\iff a_0h_0 + \frac{1}{3}b_1h_0 = \Delta y_0$$

$$\iff a_0 = \frac{\Delta y_0}{h_0} - \frac{1}{3}b_1h_0 = 1 - \frac{1}{3}b_1$$

②より

$$a_1h_1 + b_1h_1^2 + c_1h_1^3 = \Delta y_1$$

$$\iff a_1h_1 + b_1h_1^2 - \frac{1}{3}b_1h_1^2 = \Delta y_1$$

$$\iff a_1 = \frac{\Delta y_1}{h_1} - \frac{2}{3}b_1h_1 = -2b_1$$

③ より

$$a_0 + 2b_0 h_0 + 3c_0 h_0^2 = a_1$$

$$\Leftrightarrow \frac{\Delta y_0}{h_0} - \frac{1}{3} b_1 h_0 + b_1 h_0 = \frac{\Delta y_1}{h_1} - \frac{2}{3} b_1 h_1$$

$$\Leftrightarrow \frac{2}{3} b_1 (h_1 + h_0) = \frac{\Delta y_1}{h_1} - \frac{\Delta y_0}{h_0}$$

$$\Leftrightarrow b_1 = \frac{3}{2} \frac{\left(\frac{\Delta y_1}{h_1} - \frac{\Delta y_0}{h_0}\right)}{h_1 + h_0} = \frac{3}{2} \frac{0-1}{1+3} = -\frac{3}{8}$$

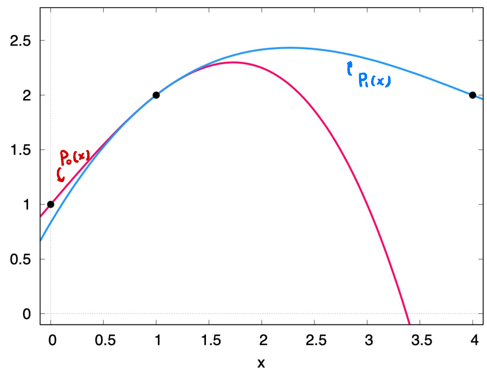
授業スライド p.6 との対応

$A = [1]$, $\mathbb{b} = [b_1]$, $\mathbb{g} = [g_1]$

$A\mathbb{b} = \mathbb{g}$

$$\Leftrightarrow b_1 = g_1 = \frac{3}{2} \frac{\left(\frac{\Delta y_1}{h_1} - \frac{\Delta y_0}{h_0}\right)}{h_1 + h_0} = \frac{3}{2} \times \left(-\frac{1}{4}\right) = -\frac{3}{8}$$

$$\begin{cases} a_0 = 1 - \frac{1}{3} b_1 = 1 + \frac{1}{8} = \frac{9}{8} \\ a_1 = -2 b_1 = \frac{3}{4} \end{cases} \qquad \begin{cases} c_0 = \frac{1}{3} b_1 = -\frac{1}{8} \\ c_1 = -\frac{1}{9} b_1 = \frac{1}{24} \end{cases}$$



$$\begin{cases} P_0(x) = 1 + \frac{9}{8} x - \frac{1}{8} x^3 \\ P_1(x) = 2 + \frac{3}{4}(x-1) - \frac{3}{8}(x-1)^2 + \frac{1}{24}(x-1)^3 \end{cases}$$ //

(2)

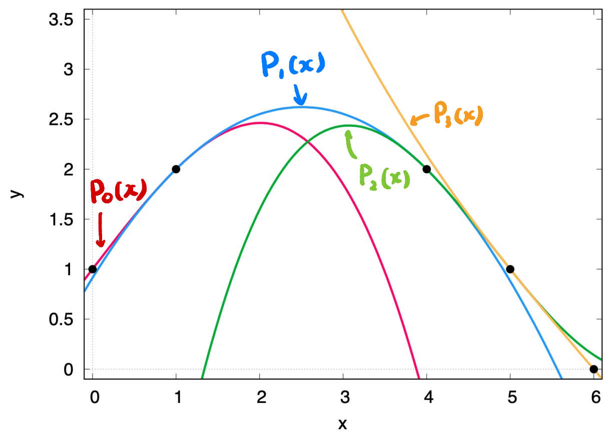
```
# Preparation

for i in range(n):
    h[i] = x[i+1] - x[i]
    dy[i] = y[i+1] - y[i]
```

```
# Constraction of tridiagnal matrix

for i in range(n):
    d[i] = 1

u[1] = 0
for i in range(2, n):
    u[i] = (1./2) * h[i-1]/(h[i-1] + h[i-2])
print("u", u)

l[0] = 0
for i in range(1,n-1):
    l[i] = (1./2) * h[i]/(h[i+1] + h[i])
print("l", l)

g[0] = 0
for i in range(1, n):
    g[i] = (3./2) * (dy[i]/h[i] - dy[i-1]/h[i-1]) / (h[i]+h[i-1])
```

```
# Solve tridiagonal systems

for i in range(1, n):
    d[i] = d[i] - u[i] * l[i-1] / d[i-1]
    g[i] = g[i] - g[i-1] * l[i-1] / d[i-1]

b[n-1] = g[n-1] / d[n-1]

for i in reversed(range(1,n-1)):
    b[i] = (g[i] - u[i+1] * b[i+1])/d[i]
```

```
# Calculate c[i] and a[i] from b[i]

for i in range(n-1):
    a[i] = dy[i]/h[i] - (1./3) * (2*b[i] + b[i+1]) * h[i]
    c[i] = (1./3) * (b[i+1]-b[i])/ h[i]
a[n-1] = dy[n-1]/h[n-1] - (2./3) * b[n-1] * h[n-1]
c[n-1] = - (1./3) * b[n-1] / h[n-1]
```

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



キーフレーズ

$A\mathbb{x} = \mathbb{b}$ の A が3重対角なら

$\mathbb{x}$ は $O(n)$ で求まる。

2020
11/22

◎ 3次スプライン補間の補間多項式の求め方

- データ点 n+1 点、補間多項式 n 本, 決定すべき係数 3n

$$P_i(x) = y_i + a_i(x-x_i) + b_i(x-x_i)^2 + c_i(x-x_i)^3 \quad (0 \le i \le n-1)$$

$$P_i'(x) = a_i + 2b_i(x-x_i) + 3c_i(x-x_i)^2 \quad (0 \le i \le n-1)$$

$$P_i''(x) = 2b_i + 6c_i(x-x_i) \quad (0 \le i \le n-1)$$

$$\begin{cases} P_i(x_{i+1}) = y_{i+1} \ (0 \le i \le n-2) \cdots ①, \quad P_{n-1}(x_n) = y_n \cdots ② \\ P_0'(x_1) = P_1'(x_1) \cdots ③, \quad P_i'(x_{i+1}) = P_{i+1}'(x_{i+1}) \ (1 \le i \le n-3) \cdots ④ \quad P_{n-2}'(x_{n-1}) = P_{n-1}'(x_{n-1}) \cdots ⑤ \\ P_i''(x_{i+1}) = P_{i+1}''(x_{i+1}) \ (0 \le i \le n-2) \cdots ⑥, \quad P_0''(x_0) = 0 \cdots ⑦, \quad P_{n-1}''(x_n) = 0 \cdots ⑧ \end{cases}$$

$$h_i = x_{i+1} - x_i \quad (0 \le i \le n-1)$$

$$\Delta y_i = y_{i+1} - y_i \quad (0 \le i \le n-1)$$

- ⑦より

$$2b_0 = 0 \quad \therefore b_0 = 0$$

ここで得られた b_0 を $u_1 = 0$, $g_0 = 0$ を用いて便宜的に

$$b_0 + u_1 b_1 = g_0 \cdots ⑦'$$

と表す. (こうすると他の端条件の時と表記をそろえることができる)

- ⑥より

$$2b_i + 6c_i(x_{i+1} - x_i) = 2b_{i+1}$$

$$\Leftrightarrow 6c_i h_i = 2(b_{i+1} - b_i)$$

$$\Leftrightarrow c_i = \frac{b_{i+1} - b_i}{3h_i} \quad (0 \le i \le n-2) \cdots ⑥'$$

- ⑧より

$$2b_{n-1} + 6c_{n-1}(x_n - x_{n-1}) = 0$$

$$\Leftrightarrow 2b_{n-1} + 6c_{n-1}h_{n-1} = 0$$

$$\Leftrightarrow c_{n-1} = -\frac{b_{n-1}}{3h_{n-1}} \cdots ⑧'$$

• ① より

$$y_i + a_i(x_{i+1}-x_i) + b_i(x_{i+1}-x_i)^2 + c_i(x_{i+1}-x_i)^3 = y_{i+1}$$

$$\iff a_i h_i + b_i h_i^2 + c_i h_i^3 = \Delta y_i$$

$$\iff a_i h_i + b_i h_i^2 + \frac{1}{3}(b_{i+1}-b_i) h_i^2 = \Delta y_i \quad (\because ⑥')$$

$$\iff a_i h_i + \frac{1}{3}(2b_i + b_{i+1}) h_i^2 = \Delta y_i$$

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

• ② より

$$y_{n-1} + a_{n-1}(x_n - x_{n-1}) + b_{n-1}(x_n - x_{n-1})^2 + c_{n-1}(x_n - x_{n-1})^2 = y_n$$

$$\iff a_i h_i + b_i h_i^2 + c_i h_i^3 = \Delta y_i$$

$$\iff a_{n-1} h_{n-1} + b_{n-1} h_{n-1}^2 + c_{n-1} h_{n-1}^3 = \Delta y_{n-1}$$

$$\iff a_{n-1} h_{n-1} + b_{n-1} h_{n-1}^2 - \frac{1}{3} b_{n-1} h_{n-1}^2 = \Delta y_{n-1} \quad (\because ⑥')$$

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

• ③ より

$$a_0 + 2b_0(x_1 - x_0) + 3c_0(x_1 - x_0)^2 = a_1$$

$$\iff a_0 + 2b_0 h_0 + 3c_0 h_0^2 = a_1$$

$$\iff \frac{\Delta y_0}{h_0} - \frac{1}{3}(2b_0 + b_1) h_0 + 2b_0 h_0 + (b_1 - b_0) h_0 = \frac{\Delta y_1}{h_1} - \frac{1}{3}(2b_1 + b_2) h_1 \quad (\because ①', ⑥')$$

$$\iff \frac{2}{3} b_1 (h_1 + h_0) + \frac{1}{3} b_2 h_1 = \frac{\Delta y_1}{h_1} - \frac{\Delta y_0}{h_0}$$

$$\iff b_1 + \frac{h_1}{2(h_1 + h_0)} b_2 = \frac{3}{2} \frac{\left(\frac{\Delta y_1}{h_1} - \frac{\Delta y_0}{h_0}\right)}{h_1 + h_0}$$

$$\iff b_1 + u_2 b_2 = g_1$$

ここで

$$u_2 = \frac{h_1}{2(h_1 + h_0)}, \quad g_1 = \frac{3}{2} \frac{\left(\frac{\Delta y_1}{h_1} - \frac{\Delta y_0}{h_0}\right)}{h_1 + h_0}$$

とおいた。また便宜的に $l_0 = 0$ とおいて式を変形すると

$$l_0 b_0 + b_1 + u_2 b_2 = g_1 \cdots ③'$$

と表せる。

・④より

$$a_i + 2b_i(x_{i+1} - x_i) + 3c_i(x_{i+1} - x_i)^2 = a_{i+1}$$

$$\Leftrightarrow a_i + 2b_i h_i + 3c_i h_i^2 = a_{i+1}$$

$$\Leftrightarrow \frac{\Delta y_i}{h_i} - \frac{1}{3}(2b_i + b_{i+1})h_i + 2b_i h_i + (b_{i+1} - b_i)h_i = \frac{\Delta y_{i+1}}{h_{i+1}} - \frac{1}{3}(2b_{i+1} + b_{i+2})h_{i+1} \quad (\because ①', ⑤')$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{3}b_i h_i + \frac{2}{3}b_{i+1}(h_{i+1} + h_i) + \frac{1}{3}b_{i+2}h_{i+1} = \frac{\Delta y_{i+1}}{h_{i+1}} - \frac{\Delta y_i}{h_i}$$

$$\Leftrightarrow \frac{h_i}{2(h_{i+1} + h_i)}b_i + b_{i+1} + \frac{h_{i+1}}{2(h_{i+1} + h_i)}b_{i+2} = \frac{3}{2}\frac{\left(\frac{\Delta y_{i+1}}{h_{i+1}} - \frac{\Delta y_i}{h_i}\right)}{h_{i+1} + h_i}$$

$$\Leftrightarrow l_i b_i + b_{i+1} + u_{i+2} b_{i+2} = g_{i+1} \quad (1 \leq i \leq n-3) \cdots ④'$$

ここで

$$l_i = \frac{h_i}{2(h_{i+1} + h_i)}, \quad u_{i+2} = \frac{h_{i+1}}{2(h_{i+1} + h_i)}, \quad g_{i+1} = \frac{3}{2}\frac{\left(\frac{\Delta y_{i+1}}{h_{i+1}} - \frac{\Delta y_i}{h_i}\right)}{h_{i+1} + h_i} \quad (1 \leq i \leq n-3)$$

とおいた。

・⑤のとき

$$a_{n-2} + 2b_{n-2}(x_{n-1} - x_{n-2}) + 3c_{n-2}(x_{n-1} - x_{n-2})^2 = a_{n-1}$$

$$\Leftrightarrow a_{n-2} + 2b_{n-2}h_{n-2} + 3c_{n-2}h_{n-2}^2 = a_{n-1}$$

$$\Leftrightarrow \frac{\Delta y_{n-2}}{h_{n-2}} - \frac{1}{3}(2b_{n-2} + b_{n-1})h_{n-2} + 2b_{n-2}h_{n-2} + (b_{n-1} - b_{n-2})h_{n-2} = \frac{\Delta y_{n-1}}{h_{n-1}} - \frac{2}{3}b_{n-1}h_{n-1}$$

$$(\because ①', ②', ⑧')$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{3}b_{n-2}h_{n-2} + \frac{2}{3}b_{n-1}(h_{n-1} + h_{n-2}) = \frac{\Delta y_{n-1}}{h_{n-1}} - \frac{\Delta y_{n-2}}{h_{n-2}}$$

$$\Leftrightarrow \frac{h_{n-2}}{2(h_{n-1} + h_{n-2})}b_{n-2} + b_{n-1} = \frac{3}{2}\frac{\left(\frac{\Delta y_{n-1}}{h_{n-1}} - \frac{\Delta y_{n-2}}{h_{n-2}}\right)}{h_{n-1} + h_{n-2}}$$

$$\Leftrightarrow l_{n-2}b_{n-2} + b_{n-1} = g_{n-1} \cdots ⑤'$$

ここで

$$l_{n-2} = \frac{h_{n-2}}{2(h_{n-1} + h_{n-2})}, \quad g_{n-1} = \frac{3}{2}\frac{\left(\frac{\Delta y_{n-1}}{h_{n-1}} - \frac{\Delta y_{n-2}}{h_{n-2}}\right)}{h_{n-1} + h_{n-2}}$$

とおいた。

$$
\begin{bmatrix}
1 & u_1 & & & & \\
\ell_0 & 1 & u_2 & & & \\
 & \ell_1 & 1 & u_3 & & \\
 & & & \ddots & & \\
 & & & \ell_{n-3} & 1 & u_{n-1} \\
 & & & & \ell_{n-2} & 1
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} k_0 \\ k_1 \\ k_2 \\ \vdots \\ k_{n-2} \\ k_{n-1} \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} g_0 \\ g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_{n-2} \\ g_{n-1} \end{bmatrix}
\begin{array}{l}
\cdots 7' \\
\cdots 3' \\
\left.\begin{array}{l} \\ \\ \\ \end{array}\right\} \cdots 4' \\
\cdots 5'
\end{array}
$$

$$
\begin{cases}
u_1 = 0, \quad u_i = \dfrac{h_{i-1}}{2(h_{i-1} + h_{i-2})} & (2 \leq i \leq n-1) \\[2ex]
\ell_0 = 0, \quad \ell_i = \dfrac{h_i}{2(h_{i+1} + h_i)} & (1 \leq i \leq n-2) \\[2ex]
g_0 = 0, \quad g_i = \dfrac{3}{2} \dfrac{\left(\dfrac{\Delta y_i}{h_i} - \dfrac{\Delta y_{i-1}}{h_{i-1}} \right)}{h_i + h_{i-1}} & (1 \leq i \leq n-1)
\end{cases}
$$

数値解析 レポート No. 8

学籍番号

氏名

[〆切] 2020/11/27 19:00

[VIII. 最小 2 乗法]

VIII-A. (1) m 個 $(m > 2)$ のデータ点 (x_i, y_i) $(1 \le i \le m)$ 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

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

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

(2) 問 1 で求めた正規方程式を $\boldsymbol{a}$ について解く事で a_0 を s_x^2, s_{xy} を用いて、a_1 を $a_0, \bar{x}, \bar{y}$ 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。

(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

(1) 残差の2乗和 S は

キーワード

正規方程式

$$S = \sum_{i=1}^{m} \{y_i - (a_0 + a_1 x_i)\}^2$$

と表され、S が最小となる a_0, a_1 で

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = 0 \cdots ①, \qquad \frac{\partial S}{\partial a_1} = 0 \cdots ②$$

となる。① より

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = -2\sum_{i=1}^{m} \{y_i - (a_0 + a_1 x_i)\} = 0$$

$$\Leftrightarrow \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} 1, & \sum_{i=1}^{m} x_i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^{m} y_i \cdots ①'$$

であり、また ② より

$$\frac{\partial S}{\partial a_1} = -2\sum_{i=1}^{m} \{y_i - (a_0 + a_1 x_i)\} x_i = 0$$

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

①', ②' より

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

//

また

$$X^T X = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_1 & x_2 & \cdots & x_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} 1 & \sum_{i=1}^{m} x_i \\ \sum_{i=1}^{m} x_i & \sum_{i=1}^{m} x_i^2 \end{bmatrix}$$

$$X^T \mathbb{y} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_1 & x_2 & \cdots & x_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} y_i \\ \sum_{i=1}^{m} x_i y_i \end{bmatrix}$$

であるから $(X^T X)\mathbb{a} = X^T \mathbb{y}$ と表せることが示された。

(2) 行列 $A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$ に対して $\det A = ad - bc \neq 0$ のとき

逆行列が存在して $A^{-1} = \frac{1}{\det A}\begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}$ と表せる。

従って $\det(X^T X) \neq 0$ のとき

$$\mathbb{a} = \underbrace{(X^T X)^{-1} X^T}_{} \mathbb{y} \quad \cdots ③$$

疑似逆行列 (pseudo-inverse matrix)

または ムーア・ペンローズの一般化逆行列 (Moore-Penrose generalized inverse) と呼ばれる

ここで $\bar{x} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} x_i$, $\bar{y} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} y_i$ であり また

$$s_x^2 = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(x_i - \bar{x})^2 = \frac{1}{m}\left(\sum_{i=1}^{m} x_i^2\right) - 2\underbrace{\frac{1}{m}\left(\sum_{i=1}^{m} x_i\right)}_{\bar{x}}\bar{x} + \bar{x}^2 = \frac{1}{m}\left(\sum_{i=1}^{m} x_i^2\right) - \bar{x}^2$$

$$\Longleftrightarrow \sum_{i=1}^{m} x_i^2 = m(s_x^2 + \bar{x}^2)$$

$$s_{xy} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = \frac{1}{m}\left(\sum_{i=1}^{m} x_i y_i\right) - \underbrace{\frac{1}{m}\left(\sum_{i=1}^{m} x_i\right)}_{\bar{x}}\bar{y} - \bar{x}\underbrace{\frac{1}{m}\left(\sum_{i=1}^{m} y_i\right)}_{\bar{y}} + \bar{x}\bar{y}$$

$$= \frac{1}{m}\left(\sum_{i=1}^{m} x_i y_i\right) - \bar{x}\bar{y}$$

$$\Longleftrightarrow \sum_{i=1}^{m} x_i y_i = m(s_{xy} + \bar{x}\bar{y})$$

X^TX, X^Ty の要素を書き換えると

$$X^TX = \begin{bmatrix} m & m\bar{x} \\ m\bar{x} & m(S_x^2+\bar{x}^2) \end{bmatrix} = m\begin{bmatrix} 1 & \bar{x} \\ \bar{x} & S_x^2+\bar{x}^2 \end{bmatrix}$$

$$\therefore \det(X^TX) = m^2(S_x^2+\bar{x}^2) - m^2\bar{x}^2 = m^2 S_x^2$$

$$X^Ty = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} y_i \\ \sum_{i=1}^{m} x_i y_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m\bar{y} \\ m(S_{xy}+\bar{x}\bar{y}) \end{bmatrix} = m\begin{bmatrix} \bar{y} \\ S_{xy}+\bar{x}\bar{y} \end{bmatrix}$$

となる。従って ③ は

$$a = \frac{1}{S_x^2}\begin{bmatrix} S_x^2+\bar{x}^2 & -\bar{x} \\ -\bar{x} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \bar{y} \\ S_{xy}+\bar{x}\bar{y} \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{S_x^2}\begin{bmatrix} (S_x^2+\cancel{\bar{x}^2})\bar{y} - \bar{x}(S_{xy}+\cancel{\bar{x}\bar{y}}) \\ S_{xy}+\cancel{\bar{x}\bar{y}} - \cancel{\bar{x}\bar{y}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{y} - \frac{S_{xy}}{S_x^2}\bar{x} \\ \frac{S_{xy}}{S_x^2} \end{bmatrix}$$

従って $a_1 = \frac{S_{xy}}{S_x^2}$, $a_0 = \bar{y} - \frac{S_{xy}}{S_x^2}\bar{x} = \bar{y} - a_1\bar{x}$ //

(3)

$a_0 = -21.25$
$a_1 = 23.00$
残差の2乗和の最小値 2.112×10^3