数値計算法 第10回

関数近似 (1)

濱本 雄治 [1]

情報工学部 情報通信工学科

2025年6月23日

[1] hamamoto@c.oka-pu.ac.jp

前々回の小テストの解説

Gauss の消去法を用いて次の連立一次方程式を解け:

$$\left\{\begin{array}{rrrrl} 2\,x_1 & +4\,x_2 & +\,x_3 & -3\,x_4 & = 0 \\ -\,x_1 & -2\,x_2 & +2\,x_3 & +4\,x_4 & = 10 \\ 4\,x_1 & +2\,x_2 & -3\,x_3 & +5\,x_4 & = 2 \\ 5\,x_1 & -4\,x_2 & -3\,x_3 & +\,x_4 & = 6 \end{array}\right.$$

$$\left(\begin{array}{rrrr|r} 2 & 4 & 1 & -3 & 0 \\ -1 & -2 & 2 & 4 & 10 \\ 4 & 2 & -3 & 5 & 2 \\ 5 & -4 & -3 & 1 & 6 \end{array}\right) \quad \begin{array}{l} \cdots(1) \\ \cdots(2) \\ \cdots(3) \\ \cdots(4) \end{array}$$

- $(2)-(1)\times(-1/2)$、$(3)-(1)\times 2$、$(4)-(1)\times 5/2$

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 2 & 4 & 1 & -3 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & \frac{5}{2} & 10 \\ 0 & -6 & -5 & 11 & 2 \\ 0 & -14 & -\frac{11}{2} & \frac{17}{2} & 6 \end{array}\right) \quad \begin{array}{l} \cdots(1) \\ \cdots(2)' \\ \cdots(3)' \\ \cdots(4)' \end{array}$$

- $(2)' \leftrightarrow (3)'$

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 2 & 4 & 1 & -3 & 0 \\ 0 & -6 & -5 & 11 & 2 \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & \frac{5}{2} & 10 \\ 0 & -14 & -\frac{11}{2} & \frac{17}{2} & 6 \end{array}\right) \quad \begin{array}{l} \cdots(1) \\ \cdots(2)'' \\ \cdots(3)'' \\ \cdots(4)' \end{array}$$

- $(4)' - (2)'' \times 7/3$

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 2 & 4 & 1 & -3 & 0 \\ 0 & -6 & -5 & 11 & 2 \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & \frac{5}{2} & 10 \\ 0 & 0 & \frac{37}{6} & -\frac{103}{6} & \frac{4}{3} \end{array}\right) \begin{array}{l} \cdots(1) \\ \cdots(2)'' \\ \cdots(3)'' \\ \cdots(4)'' \end{array}$$

- $(4)'' - (3)'' \times 37/15$

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 2 & 4 & 1 & -3 & 0 \\ 0 & -6 & -5 & 11 & 2 \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & \frac{5}{2} & 10 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{70}{3} & -\frac{70}{3} \end{array}\right) \begin{array}{l} \cdots(1) \\ \cdots(2)'' \\ \cdots(3)'' \\ \cdots(4)''' \end{array}$$

- $(4)'''$ から

$$-\frac{70}{3}x_4 = -\frac{70}{3}, \qquad x_4 = 1$$

- 2 行目と 3 行目を入れ替えたことに注意すると $(3)''$ から

$$x_2 = \frac{10 - \frac{5}{2}x_4}{\frac{5}{2}} = 3$$

- 同様に $(2)''$ から

$$x_3 = \frac{2 - 11x_4 - (-5)x_2}{-6} = -1$$

- 最後に (1) から

$$x_1 = \frac{0 - (-3)x_4 - x_2 - 4x_3}{2} = 2, \qquad \begin{cases} x_1 = 2, \\ x_2 = 3, \\ x_3 = -1, \\ x_4 = 1 \end{cases}$$

復習: 連立一次方程式の反復法

- 係数 $\boldsymbol{A}$ を対角行列 $\boldsymbol{D}$、下三角行列 $\boldsymbol{L}$、上三角行列 $\boldsymbol{U}$ に分解

$$(\boldsymbol{D} + \boldsymbol{L} + \boldsymbol{U})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

- Jacobi 法の漸化式

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{D}^{-1}[\boldsymbol{b} - (\boldsymbol{L} + \boldsymbol{U})\boldsymbol{x}_k]$$

- Gauss-Seidel 法の漸化式

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = (\boldsymbol{D} + \boldsymbol{L})^{-1}(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{U}\boldsymbol{x}_k)$$

Jacobi 法と類似した形に書き直すと

$$\therefore \boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{D}^{-1}[\boldsymbol{b} - (\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}_{k+1} + \boldsymbol{U}\boldsymbol{x}_k)]$$

前回の小テストの解説

次の連立一次方程式を Gauss-Seidel 法で解くとき漸化式を求めよ:

$$\begin{cases} 3x \qquad\qquad - z = 2 \\ \ \ x + 2y \qquad\quad = 0 \\ \ \ x - y + 3z = 1 \end{cases}$$

- 連立一次方程式を行列で表すと

$$\begin{pmatrix} 3 & 0 & -1 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & -1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad (\boldsymbol{D} + \boldsymbol{L} + \boldsymbol{U})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b},$$

$$\boldsymbol{D} = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{L} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

▶ Gauss-Seidel 法の定義から

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{L}\boldsymbol{x}_{k+1} - \boldsymbol{U}\boldsymbol{x}_k)$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix} \left\{ \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{k+1} \\ y_{k+1} \\ z_{k+1} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_k \\ y_k \\ z_k \end{pmatrix} \right\}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} 2 - z_k \\ -x_{k+1} \\ 1 - x_{k+1} + y_{k+1} \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{L}\text{ が掛かる項は } k+1}$$

▶ よって求める漸化式は

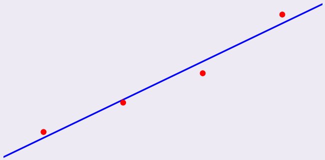
$$\begin{cases} x_{k+1} = \dfrac{2 - z_k}{3} \\[2ex] y_{k+1} = \dfrac{-x_{k+1}}{2} \\[2ex] z_{k+1} = \dfrac{1 - x_{k+1} + y_{k+1}}{3} \end{cases}$$

関数近似とは

- $y = f(x)$ を満たす点 (x_k, y_k) の集合が与えられたとき関数 $f(x)$ を別の関数 $g(x)$ で近似

回帰

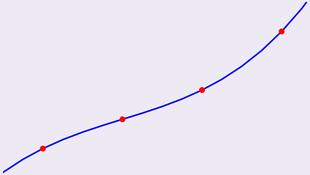
- データ点の傾向を把握



- 最小二乗法、リッジ回帰など

補間

- データ点をすべて通過



- Lagrange 補間、Newton 補間など

最小二乗法

- 関数 $f(x)$ を次の n 次多項式で近似

$$p_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_n x^n \qquad \text{(最小二乗近似多項式)}$$

- 係数 $a_0, \cdots, a_n$ の決め方
  - p_n が与えられた点すべてを通過することは要求しない
  - 代わりに $p_n(x)$ と $f(x)$ の差を最小化する
- m 個のデータ点が与えられたとき、誤差の二乗の総和

$$\sum_{k=1}^{m} |p_n(x_k) - y_k|^2$$

を最小化する (最小二乗近似)

$n = 1$ の場合

- 最小二乗近似 1 次多項式

$$p(x) = a + bx$$

- m 個の点 $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \cdots, (x_m, y_m)$ が与えられたとき誤差の二乗の和は

$$\begin{aligned} Q(a, b) &= \sum_{k=1}^{m} |a + bx_k - y_k|^2 \\ &= ma^2 + 2abS_x + b^2 S_{x^2} - 2aS_y - 2bS_{xy} + S_{y^2} \end{aligned}$$

$$m = \sum_k 1, \qquad S_x = \sum_k x_k, \qquad S_{x^2} = \sum_k {x_k}^2,$$
$$S_y = \sum_k y_k, \qquad S_{xy} = \sum_k x_k y_k, \qquad S_{y^2} = \sum_k {y_k}^2$$

係数の決定

- a に関する偏微分

$$\frac{\partial Q}{\partial a} = 2ma + 2bS_x - 2S_y = 0$$

- b に関する偏微分

$$\frac{\partial Q}{\partial b} = 2aS_x + 2bS_{xx} - 2S_{xy} = 0$$

- よって a, b を決定する方程式は

$$\left\{ \begin{array}{rcl} m\ a + S_x\ b &=& S_y \\ S_x\ a + S_{xx}\ b &=& S_{xy} \end{array} \right. , \qquad \therefore \begin{pmatrix} m & S_x \\ S_x & S_{xx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_y \\ S_{xy} \end{pmatrix}$$

Cramer の公式

- n 変数連立一次方程式

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b},$$

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

- $\boldsymbol{A}$ の第 i 列を $\boldsymbol{b}$ で置き換えた行列を $\boldsymbol{A}_i$ と書くと $\boldsymbol{x}$ の第 i 成分は

$$x_i = \frac{\det \boldsymbol{A}_i}{\det \boldsymbol{A}}$$

Cramer の公式の例

- 2 変数連立一次方程式

$$\begin{cases} A\,x + B\,y = E \\ C\,x + D\,y = F \end{cases}, \qquad \therefore \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix}$$

の解は

$$x = \frac{\begin{vmatrix} E & B \\ F & D \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} A & B \\ C & D \end{vmatrix}} = \frac{ED - BF}{AD - BC}, \qquad y = \frac{\begin{vmatrix} A & E \\ C & F \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} A & B \\ C & D \end{vmatrix}} = \frac{AF - EC}{AD - BC}$$

最小二乗1次多項式の決定

- 係数 a, b を決定する正規方程式

$$\begin{pmatrix} m & S_x \\ S_x & S_{xx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_y \\ S_{xy} \end{pmatrix}$$

- Cramer の公式から

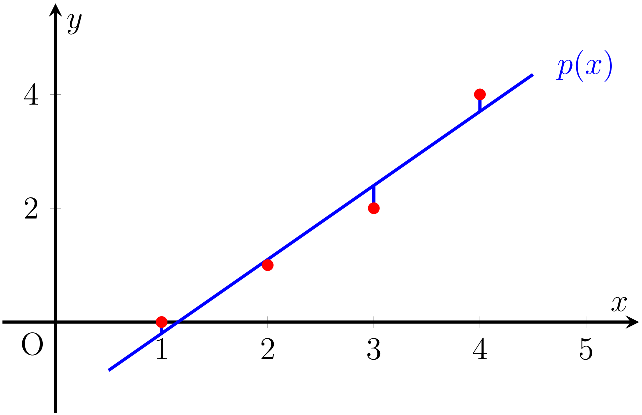
$$a = \frac{S_y S_{xx} - S_x S_{xy}}{m S_{xx} - {S_x}^2}, \quad b = \frac{m S_{xy} - S_y S_x}{m S_{xx} - {S_x}^2}$$

- データ点が $(1,0), (2,1), (3,2), (4,4)$ のとき

$$m = 4, \qquad S_x = 10, \qquad S_{xx} = 30, \qquad S_y = 7, \qquad S_{xy} = 24,$$

$$\therefore a = \frac{7 \times 30 - 10 \times 24}{4 \times 30 - 10^2} = -\frac{3}{2}, \qquad b = \frac{4 \times 24 - 7 \times 10}{4 \times 30 - 10^2} = \frac{13}{10}$$

最小二乗１次多項式の可視化



$n = 2$ の場合

- 最小二乗近似 2 次多項式

$$p(x) = a + bx + cx^2$$

- 係数 a, b, c を決定する正規方程式

$$\begin{pmatrix} m & S_x & S_{x^2} \\ S_x & S_{x^2} & S_{x^3} \\ S_{x^2} & S_{x^3} & S_{x^4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_y \\ S_{xy} \\ S_{x^2y} \end{pmatrix},$$

$$m = \sum_k 1, \quad S_x = \sum_k x_k, \quad S_{x^2} = \sum_k {x_k}^2, \quad S_{x^3} = \sum_k {x_k}^3,$$

$$S_{x^4} = \sum_k {x_k}^4, \quad S_y = \sum_k y_k, \quad S_{xy} = \sum_k x_k y_k, \quad S_{x^2y} = \sum_k {x_k}^2 y_k$$

最小二乗 2 次多項式の決定

- 計算すべき行列式

$$\det \boldsymbol{A} = \begin{vmatrix} m & S_x & S_{x^2} \\ S_x & S_{x^2} & S_{x^3} \\ S_{x^2} & S_{x^3} & S_{x^4} \end{vmatrix}, \qquad \det \boldsymbol{A}_1 = \begin{vmatrix} S_y & S_x & S_{x^2} \\ S_{xy} & S_{x^2} & S_{x^3} \\ S_{x^2y} & S_{x^3} & S_{x^4} \end{vmatrix},$$

$$\det \boldsymbol{A}_2 = \begin{vmatrix} m & S_y & S_{x^2} \\ S_x & S_{xy} & S_{x^3} \\ S_{x^2} & S_{x^2y} & S_{x^4} \end{vmatrix}, \qquad \det \boldsymbol{A}_3 = \begin{vmatrix} m & S_x & S_y \\ S_x & S_{x^2} & S_{xy} \\ S_{x^2} & S_{x^3} & S_{x^2y} \end{vmatrix}$$

- Cramer の公式から

$$a = \frac{\det \boldsymbol{A}_1}{\det \boldsymbol{A}}, \qquad b = \frac{\det \boldsymbol{A}_2}{\det \boldsymbol{A}}, \qquad c = \frac{\det \boldsymbol{A}_3}{\det \boldsymbol{A}}$$

- データ点が $(1,0), (2,1), (3,2), (4,4)$ のとき

$$m = 4, \quad S_x = 10, \quad S_{x^2} = 30, \quad S_{x^3} = 100,$$

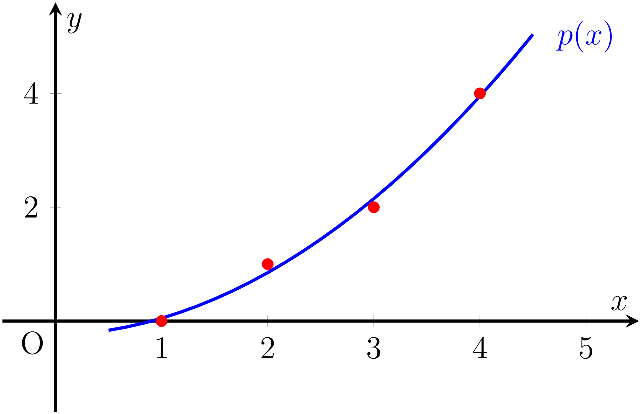
$$S_{x^4} = 354, \quad S_y = 7, \quad S_{xy} = 24, \quad S_{x^2y} = 86$$

$$|\boldsymbol{A}| = \begin{vmatrix} 4 & 10 & 30 \\ 10 & 30 & 100 \\ 30 & 100 & 354 \end{vmatrix} = 80, \quad |\boldsymbol{A}_1| = \begin{vmatrix} 7 & 10 & 30 \\ 24 & 30 & 100 \\ 86 & 100 & 354 \end{vmatrix} = -20,$$

$$|\boldsymbol{A}_2| = \begin{vmatrix} 4 & 7 & 30 \\ 10 & 24 & 100 \\ 30 & 86 & 354 \end{vmatrix} = 4, \quad |\boldsymbol{A}_3| = \begin{vmatrix} 4 & 10 & 7 \\ 10 & 30 & 24 \\ 30 & 100 & 86 \end{vmatrix} = 20$$

$$a = \frac{-20}{80} = -\frac{1}{4}, \quad b = \frac{4}{80} = \frac{1}{20}, \quad c = \frac{20}{80} = \frac{1}{4}$$

最小二乗２次多項式の可視化



一般の n の場合

- 最小二乗近似 n 次多項式

$$p(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_n x^n$$

- 係数 a_0, b, c を決定する正規方程式

$$\begin{pmatrix} m & S_{x^1} & \cdots & S_{x^n} \\ S_{x^1} & S_{x^2} & \cdots & S_{x^{n+1}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{x^n} & S_{x^{n+1}} & \cdots & S_{x^{2n}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{x^0 y} \\ S_{x^1 y} \\ \vdots \\ S_{x^n y} \end{pmatrix},$$

$$m = \sum_k 1, \qquad S_{x^\ell} = \sum_k {x_k}^\ell, \qquad S_{x^\ell y} = \sum_k {x_k}^\ell y_k$$