



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

¹hamamoto@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:

$$\begin{cases} 2x_1 + 4x_2 + x_3 - 3x_4 = 0 \\ -x_1 - 2x_2 + 2x_3 + 4x_4 = 10 \\ 4x_1 + 2x_2 - 3x_3 + 5x_4 = 2 \\ 5x_1 - 4x_2 - 3x_3 + x_4 = 6 \end{cases}$$

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



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

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

► $(2)' \leftrightarrow (3)'$

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



► $(4)' - (2)'' \times 7/3$

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

► $(4)'' - (3)'' \times 37/15$

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



▶ (4)''' から

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

▶ (3)'' から

$$x_3 = \frac{10 - \frac{5}{2}x_4}{\frac{5}{2}} = 3$$

▶ (2)' から

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

▶ 最後に (1) から

$$x_1 = \frac{0 - (-3)x_4 - x_3 - 4x_2}{2} = 2, \quad \left\{ \begin{array}{l} x_1 = 2, \\ x_2 = -1, \\ x_3 = 3, \\ x_4 = 1 \end{array} \right.$$

復習：連立一次方程式の反復法



- ▶ 係数 A を対角行列 D 、下三角行列 L 、上三角行列 U に分解

$$(D + L + U)x = b$$

- ▶ Jacobi 法の漸化式

$$x_{k+1} = D^{-1}[b - (L + U)x_k]$$

- ▶ Gauss-Seidel 法の漸化式

$$x_{k+1} = (D + L)^{-1}(b - Ux_k)$$

Jacobi 法と類似した形に書き直すと

$$\therefore x_{k+1} = D^{-1}[b - (Lx_{k+1} + Ux_k)]$$

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:

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

▶ 連立一次方程式を行列で表すと

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

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

► Gauss-Seidel 法の定義から



$$\begin{aligned}
 \mathbf{x}_{k+1} &= \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{b} - \mathbf{L}\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{U}\mathbf{x}_k) \\
 &= \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix} \left\{ \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{k+1} \\ y_{k+1} \\ z_{k+1} \end{pmatrix} \right. \\
 &\quad \left. - \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_k \\ y_k \\ z_k \end{pmatrix} \right\} \\
 &= \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} 2 - z_k \\ -x_{k+1} \\ 1 - x_{k+1} + y_{k+1} \end{pmatrix}}_{\mathbf{L}(\mathbf{U}) \text{ が掛かる項は } k+1(k)}
 \end{aligned}$$

▶ よって求める漸化式は



$$\left\{ \begin{array}{l} x_{k+1} = \frac{2 - z_k}{3} \\ y_{k+1} = \frac{-x_{k+1}}{2} \\ z_{k+1} = \frac{1 - x_{k+1} + y_{k+1}}{3} \end{array} \right.$$

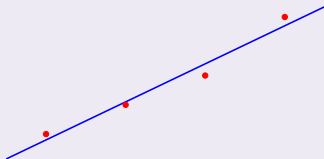
関数近似とは



- ▶ $y = f(x)$ 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

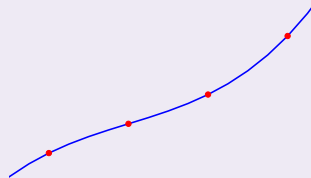
- ▶ データ点の傾向を把握



- ▶ 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

$$p_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n \quad (\text{最小二乗近似多項式})$$

- ▶ 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 個のデータ点を与えられたとき、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 $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_m, y_m)$ が与えられたとき 誤差の二乗の和は

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

$$\begin{aligned} m &= \sum_k 1, & S_x &= \sum_k x_k, & S_{x^2} &= \sum_k x_k^2, \\ S_y &= \sum_k y_k, & S_{xy} &= \sum_k x_k y_k, & S_{y^2} &= \sum_k y_k^2 \end{aligned}$$

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

$$\begin{cases} m a + S_x b = S_y \\ S_x a + S_{xx} b = S_{xy} \end{cases}, \quad \therefore \begin{pmatrix} m & S_x \\ S_x & S_{xx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_y \\ S_{xy} \end{pmatrix}$$

Cramer の公式



▶ n 変数連立一次方程式

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

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

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

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

Cramer の公式の例



▶ 2 変数連立一次方程式

$$\begin{cases} Ax + By = E \\ Cx + Dy = F \end{cases}, \quad \therefore \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \textcolor{red}{E} \\ \textcolor{blue}{F} \end{pmatrix}$$

の解は

$$x = \frac{\begin{vmatrix} \textcolor{red}{E} & B \\ \textcolor{blue}{F} & D \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} A & B \\ C & D \end{vmatrix}} = \frac{\textcolor{red}{E}D - B\textcolor{blue}{F}}{AD - BC}, \quad y = \frac{\begin{vmatrix} A & \textcolor{red}{E} \\ C & \textcolor{blue}{F} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} A & B \\ C & D \end{vmatrix}} = \frac{A\textcolor{blue}{F} - \textcolor{red}{E}C}{AD - BC}$$

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

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

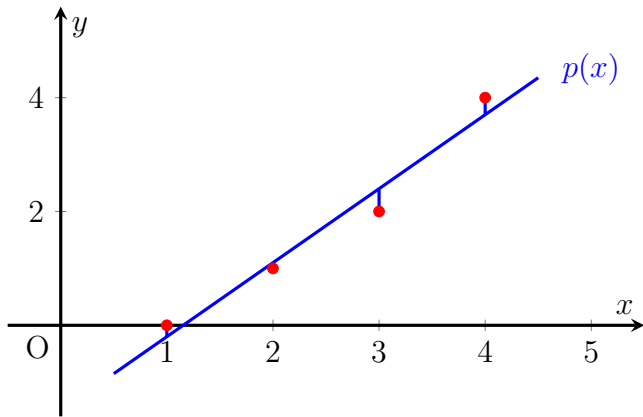
- ▶ Cramer の公式から

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

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

$$\begin{aligned} m &= 4, & S_x &= 10, & S_{xx} &= 30, & S_y &= 7, & S_{xy} &= 24, \\ \therefore a &= \frac{7 \times 30 - 10 \times 24}{4 \times 30 - 10^2} = -\frac{3}{2}, & b &= \frac{4 \times 24 - 7 \times 10}{4 \times 30 - 10^2} = \frac{13}{10} \end{aligned}$$

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

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

$$\begin{aligned} m &= \sum_k 1, & S_x &= \sum_k x_k, & S_{x^2} &= \sum_k x_k^2, & S_{x^3} &= \sum_k x_k^3, \\ S_{x^4} &= \sum_k x_k^4, & S_y &= \sum_k y_k, & S_{xy} &= \sum_k x_k y_k, & S_{x^2y} &= \sum_k x_k^2 y_k \end{aligned}$$

最小二乗 2 次多項式の決定



▶ 計算すべき行列式

$$\det \mathbf{A} = \begin{vmatrix} m & S_x & S_{x^2} \\ S_x & S_{x^2} & S_{x^3} \\ S_{x^2} & S_{x^3} & S_{x^4} \end{vmatrix}, \quad \det \mathbf{A}_1 = \begin{vmatrix} S_y & S_x & S_{x^2} \\ S_{xy} & S_{x^2} & S_{x^3} \\ S_{x^2y} & S_{x^3} & S_{x^4} \end{vmatrix},$$
$$\det \mathbf{A}_2 = \begin{vmatrix} m & S_y & S_{x^2} \\ S_x & S_{xy} & S_{x^3} \\ S_{x^2} & S_{x^2y} & S_{x^4} \end{vmatrix}, \quad \det \mathbf{A}_3 = \begin{vmatrix} m & S_x & S_y \\ S_x & S_{x^2} & S_{xy} \\ S_{x^2} & S_{x^3} & S_{x^2y} \end{vmatrix}$$

▶ Cramer の公式から

$$a = \frac{\det \mathbf{A}_1}{\det \mathbf{A}}, \quad b = \frac{\det \mathbf{A}_2}{\det \mathbf{A}}, \quad c = \frac{\det \mathbf{A}_3}{\det \mathbf{A}}$$

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

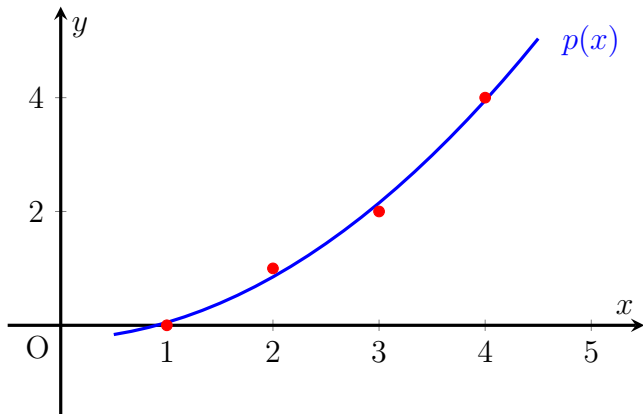


$$\begin{aligned} m &= 4, & S_x &= 10, & S_{x^2} &= 30, & S_{x^3} &= 100, \\ S_{x^4} &= 354, & S_y &= 7, & S_{xy} &= 24, & S_{x^2y} &= 86 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |\mathbf{A}| &= \begin{vmatrix} 4 & 10 & 30 \\ 10 & 30 & 100 \\ 30 & 100 & 354 \end{vmatrix} = 80, & |\mathbf{A}_1| &= \begin{vmatrix} 7 & 10 & 30 \\ 24 & 30 & 100 \\ 86 & 100 & 354 \end{vmatrix} = -20, \\ |\mathbf{A}_2| &= \begin{vmatrix} 4 & 7 & 30 \\ 10 & 24 & 100 \\ 30 & 86 & 354 \end{vmatrix} = 4, & |\mathbf{A}_3| &= \begin{vmatrix} 4 & 10 & 7 \\ 10 & 30 & 24 \\ 30 & 100 & 86 \end{vmatrix} = 20 \end{aligned}$$

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

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

$$p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n$$

▶ 係数 $a_0, a_1, a_2, \cdots, a_n$ を決定する正規方程式

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

$$S_{x^\ell} = \sum_k x_k^\ell, \quad S_{x^\ell y} = \sum_k x_k^\ell y_k$$