応用数学 練習問題2 解答例

情報工学科 篠埜 功

2015年4月20日

この資料では、今日の練習問題の解答をグラフとともに示す。正規方程式 (normal equation) の形にしてから値を入れて計算する場合と最初から値を入れて計算する場合の両方の解答を示す。

問　以下の4点に最も近い2次関数を求め、4点とともに図示せよ。近さの尺度としては講義で説明した、y座標の差の2乗の和 (の半分) を用いよ。

$$(-1,0),(0,-1),(1,0),(2,1)$$

解答1　求める関数を $f(x) = ax^2+bx+c$、与えられた4点を $(x_1,y_1) = (-1,0), (x_2,y_2) = (0,-1), (x_3,y_3) = (1,0), (x_4,y_4) = (2,1)$ とおく。関数 $f(x)$ と4点の y 座標の差の2乗和の半分

$$J = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{4}(f(x_i)-y_i)^2 = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{4}(ax_i^2+bx_i+c-y_i)^2$$

を最小にするような a,b,c を求めればよい。J を最小にするには、J の a,b,c での偏微分が0になる点を求めればよい。つまり、

$$\frac{\partial J}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial J}{\partial b} = 0, \quad \frac{\partial J}{\partial c} = 0$$

を解けばよい。まず、a での偏微分は、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial J}{\partial a} &= \frac{\partial}{\partial a}\{\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{4}(ax_i^2+bx_i+c-y_i)^2\} \\
&= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{4}\frac{\partial}{\partial a}(ax_i^2+bx_i+c-y_i)^2 \\
&= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{4}2(ax_i^2+bx_i+c-y_i)\frac{\partial}{\partial a}(ax_i^2+bx_i+c-y_i) \\
&= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{4}2(ax_i^2+bx_i+c-y_i)x_i^2
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{i=1}^{4}(ax_i^2+bx_i+c-y_i)x_i^2 \\
&= \sum_{i=1}^{4}(ax_i^4+bx_i^3+cx_i^2-x_i^2y_i) \\
&= a\sum_{i=1}^{4}x_i^4+b\sum_{i=1}^{4}x_i^3+c\sum_{i=1}^{4}x_i^2-\sum_{i=1}^{4}x_i^2y_i
\end{aligned}
$$

である。次に、b での偏微分は、

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial J}{\partial b} &= \frac{\partial}{\partial b}\{\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{4}(ax_i^2+bx_i+c-y_i)^2\} \\
&= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{4}\frac{\partial}{\partial b}(ax_i^2+bx_i+c-y_i)^2 \\
&= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{4}2(ax_i^2+bx_i+c-y_i)\frac{\partial}{\partial b}(ax_i^2+bx_i+c-y_i) \\
&= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{4}2(ax_i^2+bx_i+c-y_i)x_i \\
&= \sum_{i=1}^{4}(ax_i^2+bx_i+c-y_i)x_i \\
&= \sum_{i=1}^{4}(ax_i^3+bx_i^2+cx_i-x_iy_i) \\
&= a\sum_{i=1}^{4}x_i^3+b\sum_{i=1}^{4}x_i^2+c\sum_{i=1}^{4}x_i-\sum_{i=1}^{4}x_iy_i
\end{aligned}
$$

である。次に、c での偏微分は、

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial J}{\partial c} &= \frac{\partial}{\partial c}\{\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{4}(ax_i^2+bx_i+c-y_i)^2\} \\
&= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{4}\frac{\partial}{\partial c}(ax_i^2+bx_i+c-y_i)^2 \\
&= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{4}2(ax_i^2+bx_i+c-y_i)\frac{\partial}{\partial c}(ax_i^2+bx_i+c-y_i) \\
&= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{4}2(ax_i^2+bx_i+c-y_i)1 \\
&= \sum_{i=1}^{4}(ax_i^2+bx_i+c-y_i) \\
&= a\sum_{i=1}^{4}x_i^2+b\sum_{i=1}^{4}x_i+c\sum_{i=1}^{4}1-\sum_{i=1}^{4}y_i
\end{aligned}
$$

である。これらを 0 とおくと、a, b, c に関する連立一次方程式となる。係数を計算すると、

$$\sum_{i=1}^{4} x_i^4 = 18, \quad \sum_{i=1}^{4} x_i^3 = 8, \quad \sum_{i=1}^{4} x_i^2 = 6, \quad \sum_{i=1}^{4} x_i = 2$$
$$\sum_{i=1}^{4} 1 = 4, \quad \sum_{i=1}^{4} x_i^2 y_i = 4, \quad \sum_{i=1}^{4} x_i y_i = 2, \quad \sum_{i=1}^{4} y_i = 0$$

である。よって、連立一次方程式は

$$\begin{aligned}
18a + 8b + 6c - 4 &= 0 \quad \cdots (1) \\
8a + 6b + 2c - 2 &= 0 \quad \cdots (2) \\
6a + 2b + 4c &= 0 \quad \cdots (3)
\end{aligned}$$

となる。これを解くと、

$$a = \frac{1}{2}, \quad b = -\frac{1}{10}, \quad c = -\frac{7}{10}$$

を得る。以上より、求める関数は

$$f(x) = \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{10}x - \frac{7}{10}$$

である。これを 4 点とともに図示すると、図 1 のようになる。図 1 において、緑色の $\times$ 記号が与えられた点であり、赤色の曲線が求めた 2 次関数である。

解答 2　求める関数を $f(x) = ax^2 + bx + c$ とおく。関数 $f(x)$ と 4 点との y 座標の差の 2 乗和の半分を J とおく。

$$\begin{aligned}
J &= \frac{1}{2}\Big\{\{f(-1) - 0\}^2 + \{f(0) - (-1)\}^2 + \{f(1) - 0\}^2 + \{f(2) - 1\}^2\Big\} \\
&= \frac{1}{2}\Big\{(a - b + c)^2 + (c + 1)^2 + (a + b + c)^2 + (4a + 2b + c - 1)^2\Big\}
\end{aligned}$$

この J が最小になる a, b, c を求めればよい。J を最小にするは、J の a, b, c での偏微分が 0 になる点を求めればよい。つまり、

$$\frac{\partial J}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial J}{\partial b} = 0, \quad \frac{\partial J}{\partial c} = 0$$

を解けばよい。まず、a での偏微分は、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial J}{\partial a} &= \frac{\partial}{\partial a}\left\{\frac{1}{2}\Big\{(a - b + c)^2 + (c + 1)^2 + (a + b + c)^2 + (4a + 2b + c - 1)^2\Big\}\right\} \\
&= \frac{1}{2}\left\{\frac{\partial}{\partial a}(a - b + c)^2 + \frac{\partial}{\partial a}(c + 1)^2 + \frac{\partial}{\partial a}(a + b + c)^2 + \frac{\partial}{\partial a}(4a + 2b + c - 1)^2\right\} \\
&= \frac{1}{2}\Big\{2(a - b + c) + 2(a + b + c) + 2(4a + 2b + c - 1) \cdot 4\Big\} \\
&= (a - b + c) + (a + b + c) + (4a + 2b + c - 1) \cdot 4 \\
&= (a - b + c) + (a + b + c) + (16a + 8b + 4c - 4) \\
&= 18a + 8b + 6c - 4
\end{aligned}$$

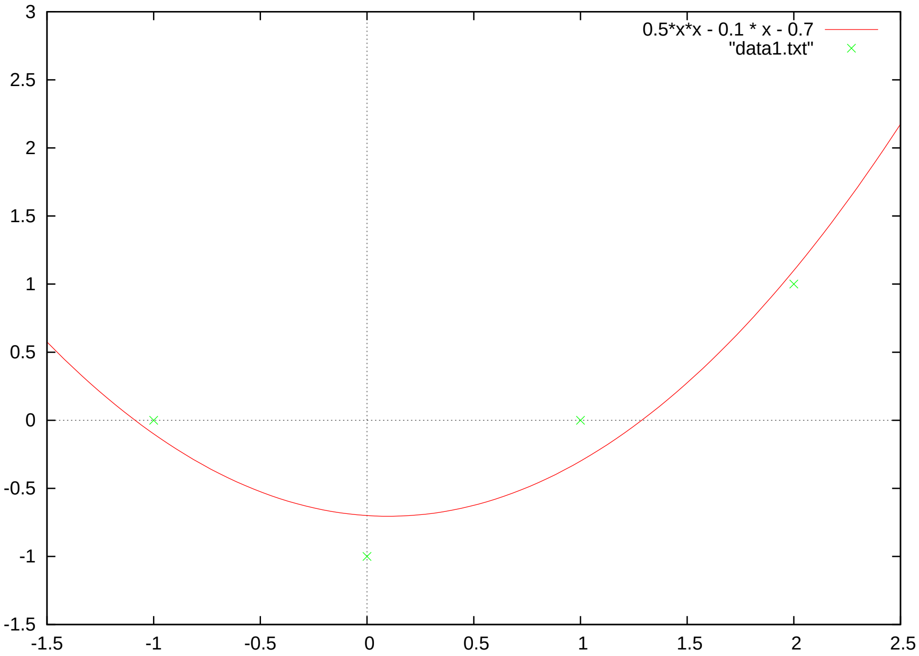

図 1: 与えられた 4 点に最も近い 2 次関数

である。
(注意) $(c+1)^2$ は a については定数であり、

$$\frac{\partial}{\partial a}(c+1)^2 = 0$$

である。
　次に、b での偏微分は、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial J}{\partial b} &= \frac{\partial}{\partial b}\left\{\frac{1}{2}\left\{(a-b+c)^2 + (c+1)^2 + (a+b+c)^2 + (4a+2b+c-1)^2\right\}\right\} \\
&= \frac{1}{2}\left\{\frac{\partial}{\partial b}(a-b+c)^2 + \frac{\partial}{\partial b}(c+1)^2 + \frac{\partial}{\partial b}(a+b+c)^2 + \frac{\partial}{\partial b}(4a+2b+c-1)^2\right\} \\
&= \frac{1}{2}\left\{2(a-b+c)\cdot(-1) + 2(a+b+c) + 2(4a+2b+c-1)\cdot 2\right\} \\
&= (a-b+c)\cdot(-1) + (a+b+c) + (4a+2b+c-1)\cdot 2 \\
&= (-a+b-c) + (a+b+c) + (8a+4b+2c-2) \\
&= 8a+6b+2c-2
\end{aligned}$$

である。
(注意) $(c+1)^2$ は b については定数であり、

$$\frac{\partial}{\partial b}(c+1)^2 = 0$$

である。

次に、c での偏微分は、

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial J}{\partial c} &= \frac{\partial}{\partial c}\left\{\frac{1}{2}\left\{(a-b+c)^2+(c+1)^2+(a+b+c)^2+(4a+2b+c-1)^2\right\}\right\} \\
&= \frac{1}{2}\left\{\frac{\partial}{\partial c}(a-b+c)^2+\frac{\partial}{\partial c}(c+1)^2+\frac{\partial}{\partial c}(a+b+c)^2+\frac{\partial}{\partial c}(4a+2b+c-1)^2\right\} \\
&= \frac{1}{2}\left\{2(a-b+c)+2(c+1)+2(a+b+c)+2(4a+2b+c-1)\right\} \\
&= (a-b+c)+(c+1)+(a+b+c)+(4a+2b+c-1) \\
&= 6a+2b+4c
\end{aligned}
$$

である。

これらを 0 とおくと、

$$
\begin{aligned}
18a+8b+6c-4 &= 0 \quad \cdots(1) \\
8a+6b+2c-2 &= 0 \quad \cdots(2) \\
6a+2b+4c &= 0 \quad \cdots(3)
\end{aligned}
$$

となる。これは 3 変数の連立一次方程式であり、これを解けばよい。

以下で、この連立一次方程式を解く手順を示す。通常はガウスの消去法などを用いるが、ここでは中学生が解くような方法で示す。以下の解き方は一例である。

まず、(1), (2), (3) を 2 で割る。

$$
\begin{aligned}
9a+4b+3c-2 &= 0 \quad \cdots(4) \\
4a+3b+c-1 &= 0 \quad \cdots(5) \\
3a+b+2c &= 0 \quad \cdots(6)
\end{aligned}
$$

まず、(5), (6) から c を消去する。(5) の 2 倍から (6) を引くと、

$$5a+5b-2=0 \quad \cdots(7)$$

となる。次に、(4), (5) から c を消去する。(5) の 3 倍から (4) を引くと、

$$3a+5b-1=0 \quad \cdots(8)$$

となる。(7), (8) は a, b に関する 2 変数の連立一次方程式である。(7) から (8) を引くと、

$$2a-1=0$$

となる。これを解くと、

$$a=\frac{1}{2}$$

となる。これを (8) に代入すると

$$\frac{3}{2} + 5b - 1 = 0$$

となり、

$$b = -\frac{1}{10}$$

となる。これらを (5) に代入すると

$$4 \cdot (-\frac{1}{2}) + 3 \cdot (-\frac{1}{10}) + c - 1 = 0$$

となり、これを解くと

$$c = -\frac{7}{10}$$

となる。以上より、求める関数は

$$f(x) = \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{10}x - \frac{7}{10}$$

である。これを 4 点とともに図示すると、図 1 のようになる。

(補足 1) ここでは有効数字の桁数を考慮せず厳密な最適解を求めたが、実際の実験データ等の解析では取得データには誤差があるので、厳密な最適解を求めても意味はなく、有効数字の桁数を考慮した計算を行う。この講義では誤差については考慮せず、厳密な最適解を計算することにする。

(補足 2) 教科書では、J の定義の中で y 座標の差を $y_i - f(x_i)$ としているが、上記回答では $f(x_i) - y_i$ としている。差を 2 乗しているので、どちらでも同じである。

(補足 3) 連立一次方程式をコンピュータで解く方法は、直接解法と反復解法の大きく 2 つに分けられる。直接解法はガウスの消去法等、線形代数で通常習う解法であり、反復解法はガウスザイデル法等、収束するまである演算を繰り返し適用する方法である。直接解法は筆算で厳密解を求める際にも使えるが、反復解法は近似解法であり、厳密解を求めるための解法ではない。