

応用数学 練習問題1 解答例

情報工学科 篠埜 功

問 以下の3点に最も近い直線を求め、3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。

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

以下では、授業で説明した正規方程式 (normal equation) の形にしてから値を入れて計算する場合 (解答1) と最初から値を入れて計算する場合 (解答2) の両方の解答を示す。解答1の方が見通しが良い。

解答1 求める関数を $f(x) = ax + b$ 、与えられた3点を $(x_1, y_1) = (0, 1), (x_2, y_2) = (1, 0), (x_3, y_3) = (2, -2)$ とおく。関数 $f(x)$ と3点の y 座標の差の2乗和の半分

$$J = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 (f(x_i) - y_i)^2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 (ax_i + b - y_i)^2$$

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

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

を解けばよい。まず、 a での偏微分は、

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

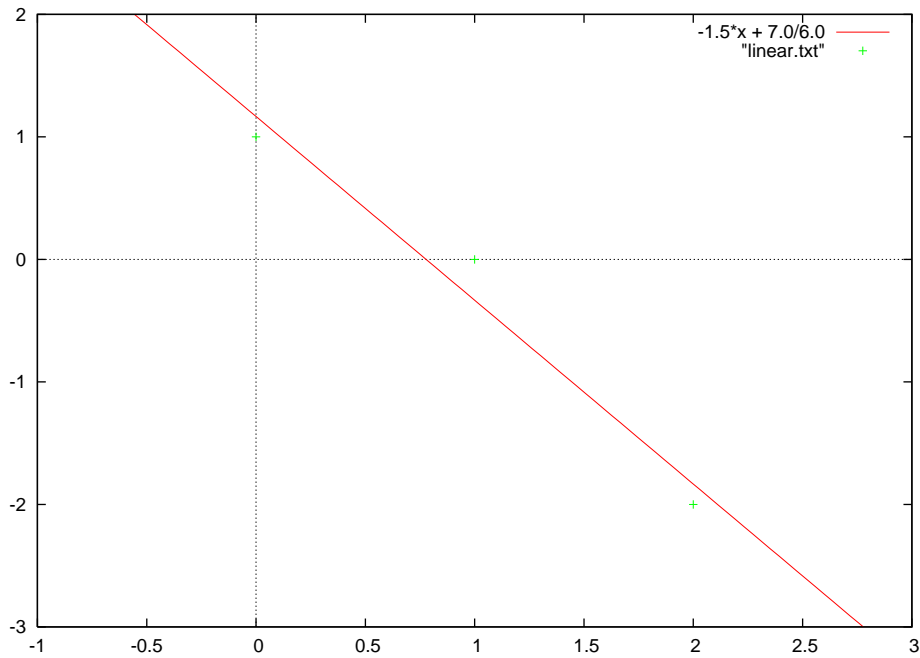


図 1: $f(x) = -\frac{3}{2}x + \frac{7}{6}$ と与えられた 3 点の比較

である。次に、 b での偏微分は、

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial J}{\partial b} &= \frac{\partial}{\partial b} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 (ax_i + b - y_i)^2 \right\} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial b} (ax_i + b - y_i)^2 \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 2(ax_i + b - y_i) \\
 &= \sum_{i=1}^3 (ax_i + b - y_i) \\
 &= a \sum_{i=1}^3 x_i + b \sum_{i=1}^3 1 - \sum_{i=1}^3 y_i
 \end{aligned}$$

である。これらを 0 とおくと、

$$\begin{aligned}
 5a + 3b + 4 &= 0 \\
 3a + 3b + 1 &= 0
 \end{aligned}$$

が得られる。(これを正規方程式 (Normal equations) という。) これを解くと、 $a = -\frac{3}{2}$, $b = \frac{7}{6}$ となる。よって求める関数は、

$$f(x) = -\frac{3}{2}x + \frac{7}{6}$$

である。これを 3 点とともに図示すると図 1 のようになる。

解答2 求める関数を $f(x) = ax + b$ とおく。関数 $f(x)$ と3点との y 座標の差の2乗和の半分を J とおく。

$$\begin{aligned} J &= \frac{1}{2} \left\{ \{f(0) - 1\}^2 + \{f(1) - 0\}^2 + \{f(2) - (-2)\}^2 \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ (b - 1)^2 + (a + b)^2 + (2a + b + 2)^2 \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ b^2 - 2b + 1 + a^2 + 2ab + b^2 + 4a^2 + b^2 + 4 + 4ab + 8a + 4b \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ 5a^2 + 3b^2 + 6ab + 8a + 2b + 5 \right\} \end{aligned}$$

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

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

を解けばよい。 a での偏微分は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial J}{\partial a} &= \frac{1}{2}(10a + 6b + 8) \\ &= 5a + 3b + 4 \end{aligned}$$

である。 b での偏微分は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial J}{\partial b} &= \frac{1}{2}(6a + 6b + 2) \\ &= 3a + 3b + 1 \end{aligned}$$

である。これらを0とおくと、

$$\begin{aligned} 5a + 3b + 4 &= 0 \\ 3a + 3b + 1 &= 0 \end{aligned}$$

が得られる。(これを正規方程式 (Normal equations) という。) 以降は解答1と同じなので省略する。

補足1 上記の正規方程式 (Normal equations) を行列で書くと

$$\begin{pmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -4 \\ -1 \end{pmatrix}$$

となる。これを解くと

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{3}{2} \\ \frac{7}{6} \end{pmatrix}$$

が得られる。行列表記を使うかどうかはどちらでも良いが、3変数以上になった場合、行列で書いた方が筆算で(ガウスの消去法などで)解くときに計算がしやすい。

補足2 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3 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4 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。