

第 11 回 データ解析 (連立方程式, 逆行列, 多項式の最小二乗法, 補間法)

目標

- ・ 連立 1 次方程式の解法を学ぶ
- ・ 逆行列の算出法を学ぶ
- ・ 多項式の最小二乗法を学ぶ
- ・ データの補間法を学ぶ

0. 準備

今日の作業をするディレクトリを作成してください.

```
% mkdir 20121220
```

```
% cd 20121220
```

1. 連立 1 次方程式と逆行列

1.1. ガウスの消去法 (掃き出し法)

以下のような連立方程式を考える.

$$\begin{aligned}
 a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\
 a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \cdots + a_{2n}x_n &= b_2 \\
 a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + \cdots + a_{3n}x_n &= b_3 \\
 &\vdots \\
 a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + \cdots + a_{nn}x_n &= b_n
 \end{aligned} \tag{1}$$

上記の連立方程式は以下のように表わすことができる.

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \tag{2}$$

この解を求める為には, 以下のような操作を行う. まず第 1 行を a_{11} で割る.

$$\begin{pmatrix} 1 & a_{12}/a_{11} & a_{13}/a_{11} & \cdots & a_{1n}/a_{11} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \cdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1/a_{11} \\ b_2 \\ b_3 \\ \cdots \\ b_n \end{pmatrix} \quad (3)$$

次に第2行から第n行に対して第1行に a_{21} から a_{n1} をそれぞれ掛けたものを引く.

$$\begin{pmatrix} 1 & a_{12}/a_{11} & a_{13}/a_{11} & \cdots & a_{1n}/a_{11} \\ 0 & a_{22} - a_{21}a_{12}/a_{11} & a_{23} - a_{21}a_{13}/a_{11} & \cdots & a_{2n} - a_{21}a_{1n}/a_{11} \\ 0 & a_{32} - a_{31}a_{12}/a_{11} & a_{33} - a_{31}a_{13}/a_{11} & \cdots & a_{3n} - a_{31}a_{1n}/a_{11} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & a_{n2} - a_{n1}a_{12}/a_{11} & a_{n3} - a_{n1}a_{13}/a_{11} & \cdots & a_{nn} - a_{n1}a_{1n}/a_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \cdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1/a_{11} \\ b_2 - a_{21}b_1/a_{11} \\ b_3 - a_{31}b_1/a_{11} \\ \cdots \\ b_n - a_{n1}b_1/a_{11} \end{pmatrix} \quad (4)$$

第2列～第n列に関しても同様な操作を繰り返す

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \cdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \\ \cdots \\ B_n \end{pmatrix} \quad (5)$$

となったときの左辺が解である.

掃き出し法のプログラム例を以下に示す. 配列の要素数に注意すること.

```
c    program01 2012/12/20
      implicit none
      real*8 a(4,5),b,c
      integer i,j,k,n

      n=4

      do i=1,n
        read(6,*) (a(i,j),j=1,n+1)
      enddo

      do i=1,n
        b=a(i,i)
        do j=i,n+1
          a(i,j) = a(i,j)/b
        enddo
        do k=1,n
          if(k.ne.i) then
            c=a(k,i)
            do j=i,n+1
              a(k,j) = a(k,j) - c*a(i,j)
            enddo
          endif
        enddo
      enddo

      do i=1,n
        write(6,*) i,(a(i,j),j=1,n+1)
      enddo
      end
```

練習問題 1

上記のプログラム例を用いて次の連立方程式を解け.

$$\begin{aligned}
 2x_1 - 2x_2 + x_3 - x_4 &= -3 \\
 x_1 + 2x_2 + 4x_3 - x_4 &= -7 \\
 -2x_1 + x_2 + 2x_3 + 5x_4 &= 8 \\
 3x_1 + 2x_2 - x_3 - 2x_4 &= 4
 \end{aligned} \tag{6}$$

1.2. 逆行列

行列 A とその逆行列 B を以下のように定義する.

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad A^{-1} = B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & \cdots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & \cdots & b_{2n} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} & \cdots & b_{3n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ b_{n1} & b_{n2} & b_{n3} & \cdots & b_{nn} \end{pmatrix} \tag{7}$$

行列 A が与えられたとき, 逆行列 B は掃き出し法のアルゴリズムで解くことができる.

定義より,

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & \cdots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & \cdots & b_{2n} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} & \cdots & b_{3n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ b_{n1} & b_{n2} & b_{n3} & \cdots & b_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \tag{8}$$

となり, 行列 B を分けて表わすと,

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{11} \\ b_{21} \\ b_{31} \\ \cdots \\ b_{n1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \cdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{12} \\ b_{22} \\ b_{32} \\ \cdots \\ b_{n2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \cdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

...

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{1n} \\ b_{2n} \\ b_{3n} \\ \cdots \\ b_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \cdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

となり、これは n 個の連立方程式から b_{ij} を求めることであり、掃き出し法のアルゴリズムで解くことができる。つまり、

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \quad (9)$$

を掃き出し法により以下のかたちに変換したとき

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & A_{11} & A_{12} & A_{13} & \cdots & A_{1n} \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & A_{21} & A_{22} & A_{23} & \cdots & A_{2n} \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & A_{31} & A_{32} & A_{33} & \cdots & A_{3n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & A_{n1} & A_{n2} & A_{n3} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix} \quad (10)$$

行列 A_{ij} が逆行列 b_{ij} を表わしている。

練習問題 2

前述の掃き出し法のプログラム例を書き換えて、逆行列を算出するプログラムをつくれ。このプログラムを用いて、以下の行列の逆行列を算出せよ。

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 2 & 1 \\ 2 & -1 & -2 \\ 3 & 5 & -1 \end{pmatrix} \quad (11)$$

2. 多項式の最小二乗法フィッティング

以前、一次式の最小二乗法フィッティングを学んだ（第三回「DO ループの応用」参照）。次は以下のような多項式を仮定した場合のフィッティングを考える。

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n = \sum_{i=0}^n a_i x^i \quad (12)$$

関数のフィッティングの条件は観測データ（ここでデータ数は m ）と関数との差の自乗和

$$Q = \sum_{j=1}^m (y_j - \sum_{i=0}^n a_i x_j^i)^2 \quad (13)$$

が最小になることである。よって、それぞれの a_i で Q を偏微分して 0 になる場合を考えればよい。

$$\frac{\partial Q}{\partial a_k} = 0 \quad 0 \leq k \leq n \quad (14)$$

これを計算すると、

$$\sum_{i=0}^n a_i \sum_{j=1}^m x_j^{i+k} = \sum_{j=1}^m x_j^k y_j \quad 0 \leq k \leq n \quad (15)$$

となり、以下の連立方程式を解くことと同じである。

$$\begin{pmatrix} m & \sum_{j=1}^m x_j & \cdots & \sum_{j=1}^m x_j^n \\ \sum_{j=1}^m x_j & \sum_{j=1}^m x_j^2 & \cdots & \sum_{j=1}^m x_j^{n+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \sum_{j=1}^m x_j^n & \sum_{j=1}^m x_j^{n+1} & \cdots & \sum_{j=1}^m x_j^{2n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \cdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^m y_j \\ \sum_{j=1}^m x_j y_j \\ \cdots \\ \sum_{j=1}^m x_j^n y_j \end{pmatrix} \quad (16)$$

練習問題 3

以下のようなデータがある。これを 3 次の多項式でフィッティングせよ。結果を gnuplot で図にして確認せよ。

x	y
-1.D0	22.D0
2.D0	2.D0
3.D0	19.D0
5.D0	35.D0
7.D0	15.D0

3. データの補間法

離散データの解析において、データ点の内挿や外挿を行う場合や解析的に解けない問題を扱う場合に補間法が重要となるケースがある。ここでは代表的な補間法としてプログラミングが比較的容易であるラグランジュの補間法を学ぶ。

$n+1$ 個のデータ点 (x_i, y_i) が与えられ、未知関数 $y = f(x)$ で関係づけられているとき、点 x_i 以外における y の値を求める場合を考える。ラグランジュの補間法は全てのデータ点を通る n 次多項式

$$P_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_n x^n = \sum_{i=0}^n a_i x^i \quad (17)$$

を決定し、離散的に与えられた点 x_i 以外における $f(x)$ に近似しようというものである。 $P_n(x)$ は次のラグランジュの補間多項式で与えられる。

$$\begin{aligned}
 P_n(x) &= y_0 \frac{(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)\cdots(x_0-x_n)} + y_1 \frac{(x-x_0)(x-x_2)\cdots(x-x_n)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)\cdots(x_1-x_n)} \\
 &\quad \cdots + y_n \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})}{(x_n-x_0)(x_n-x_1)\cdots(x_n-x_{n-1})} \\
 &= \sum_{i=0}^n y_i \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)} \quad (18)
 \end{aligned}$$

ラグランジュの補間法の問題点は新たにデータ点 (x_{i+1}, y_{i+1}) が加えられた時に、式 (18) の多項式の算出を最初からやり直さないといけないことである。また、データ点の数が非常に多い場合にデータ範囲の端の方では大きな誤差を伴うことがある。

練習問題 4

x が 0° から 90° の間で 30° , 10° , 2° 間隔で $\cos x$ の値が与えられたとき、ラグランジュの補間法によって 45° と 1° での値を計算し、真の値と比較せよ。

4. 宿題

練習問題 3 と 4 のプログラムと結果を下記アドレスに送ること。

宿題の提出先: 城野 (sirono@eps.nagoya-u.ac.jp)

諸田 (morota@eps.nagoya-u.ac.jp)

前島 (maeshima.naohiko@c.mbox.nagoya-u.ac.jp)

宿題のしめきり: 12 月 25 日 (火曜日)

5. ログアウト

作業が終了したら必ずログアウトしてください。

・ログアウト

「 マーク」=>「…をログアウト」