数値解析の入り口

2023年度1Q 5c/6c（IL1）木曜日

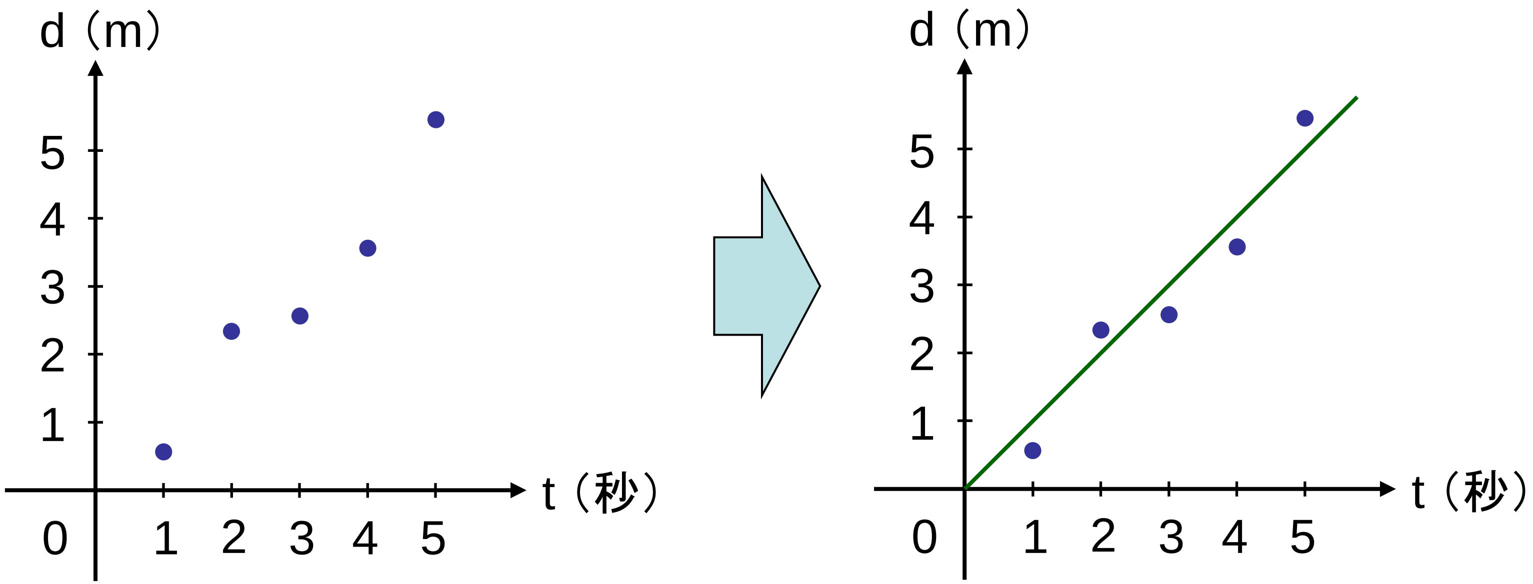
担当：地引

TA：増井

数値解析
（基本編）

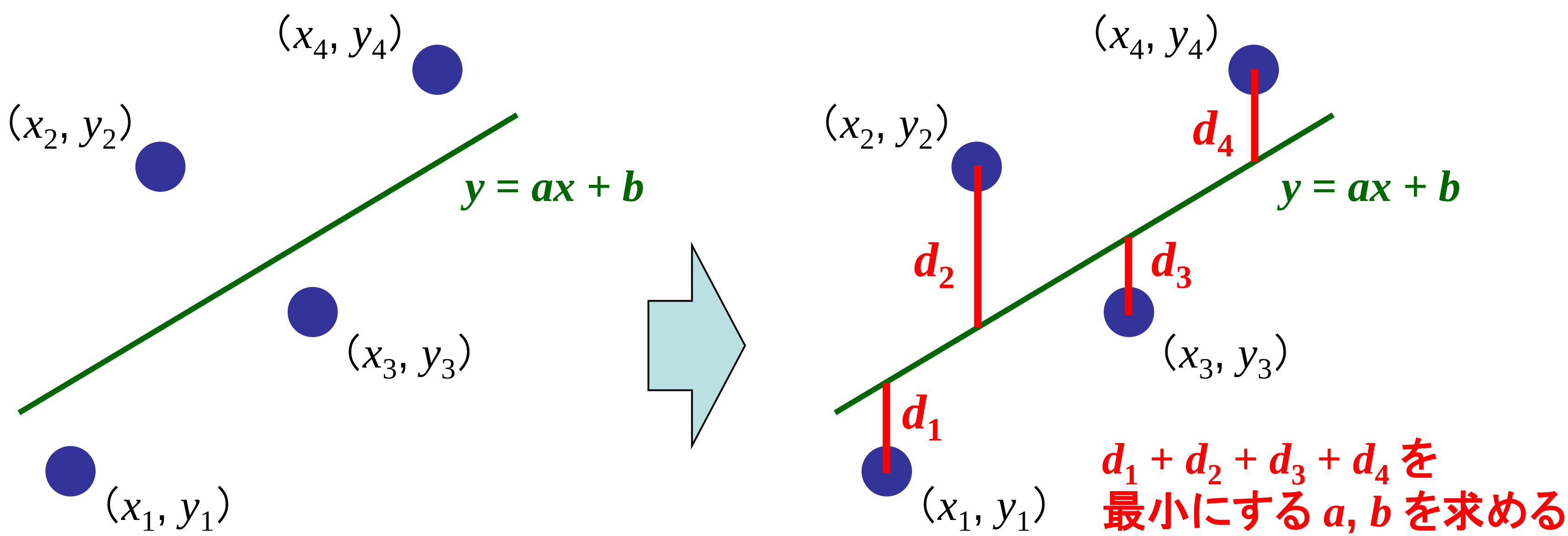
最小二乗法とは

- 計測データの傾向を分析するための解析手法
- 下左のような二次元データが存在した場合、
  下右のように各データに最も近い直線を求める。



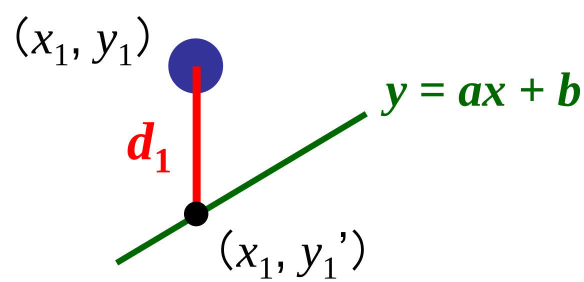
最小二乗法の考え方

- **各データに最も近い直線とは、各データと直線との全距離が最も小さくなる直線**
- 各データを (x_1, y_1) ～ (x_n, y_n) とし、直線を $y = ax + b$ として、各データと直線との距離を求める。
- 距離を最小にする a, b の組を求める。



最小二乗法の計算

- まずは（x_1, y_1）について考える。
- （x_1, y_1）と $y = ax + b$ 上の点（x_1, y_1'）との距離は、$\boldsymbol{d_1 = y_1 - y_1' = y_1 - ax_1 - b}$ となる。
- 同様に d_2 ～ d_n を求め、$\boldsymbol{S = d_1^2 + d_2^2 + \ldots + d_n^2}$ を計算すると、S は a, b の二次式になる。
  - $\boldsymbol{S(a, b) = Aa^2 + Bb^2 + Cab + Da + Eb + F}$
- **$S(a, b)$ を最小にする a, b** を、偏微分（ここでは説明しませんが、初年度の数学で取り上げるはず）を利用して求める。

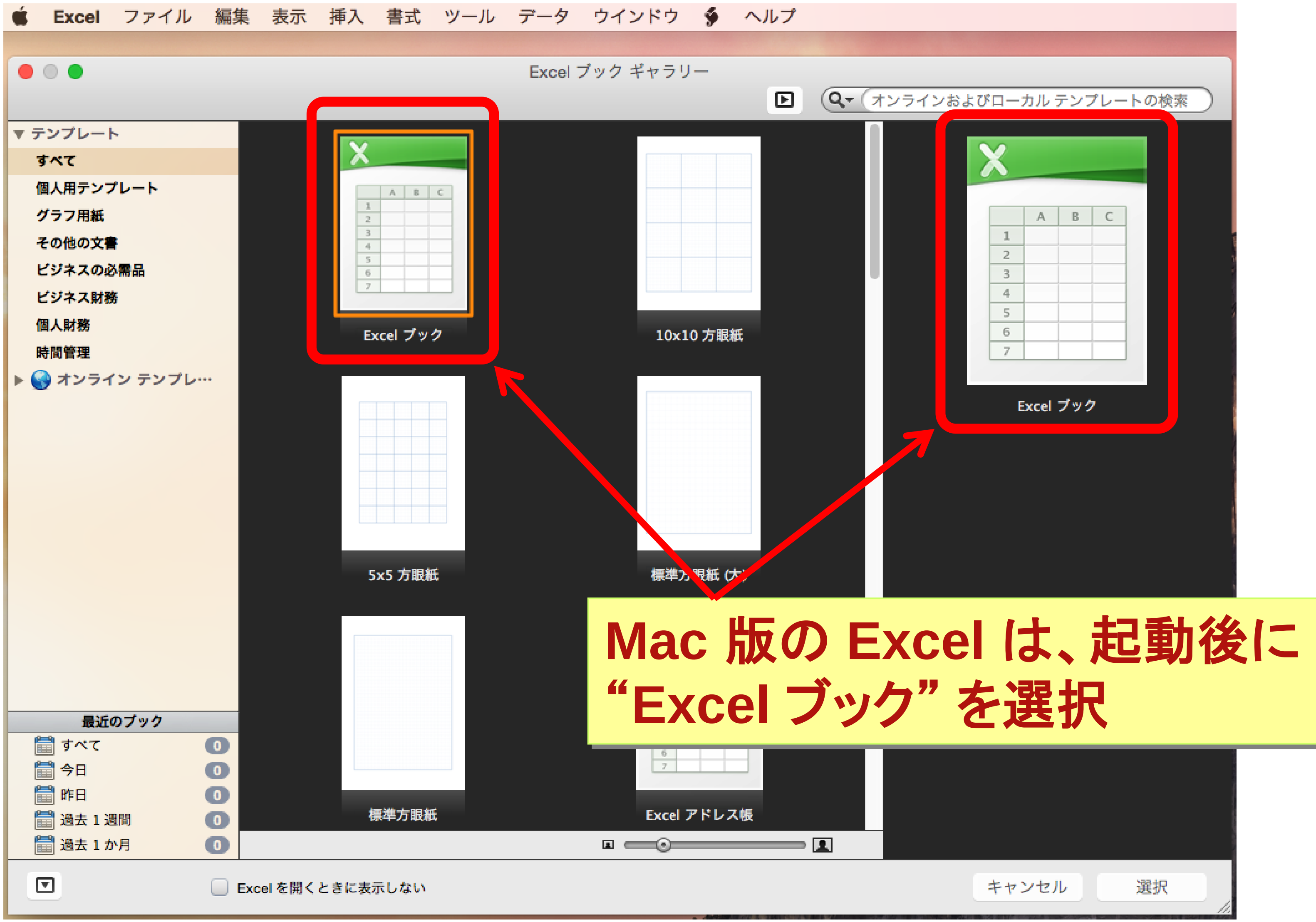


係数 a, b を求める式

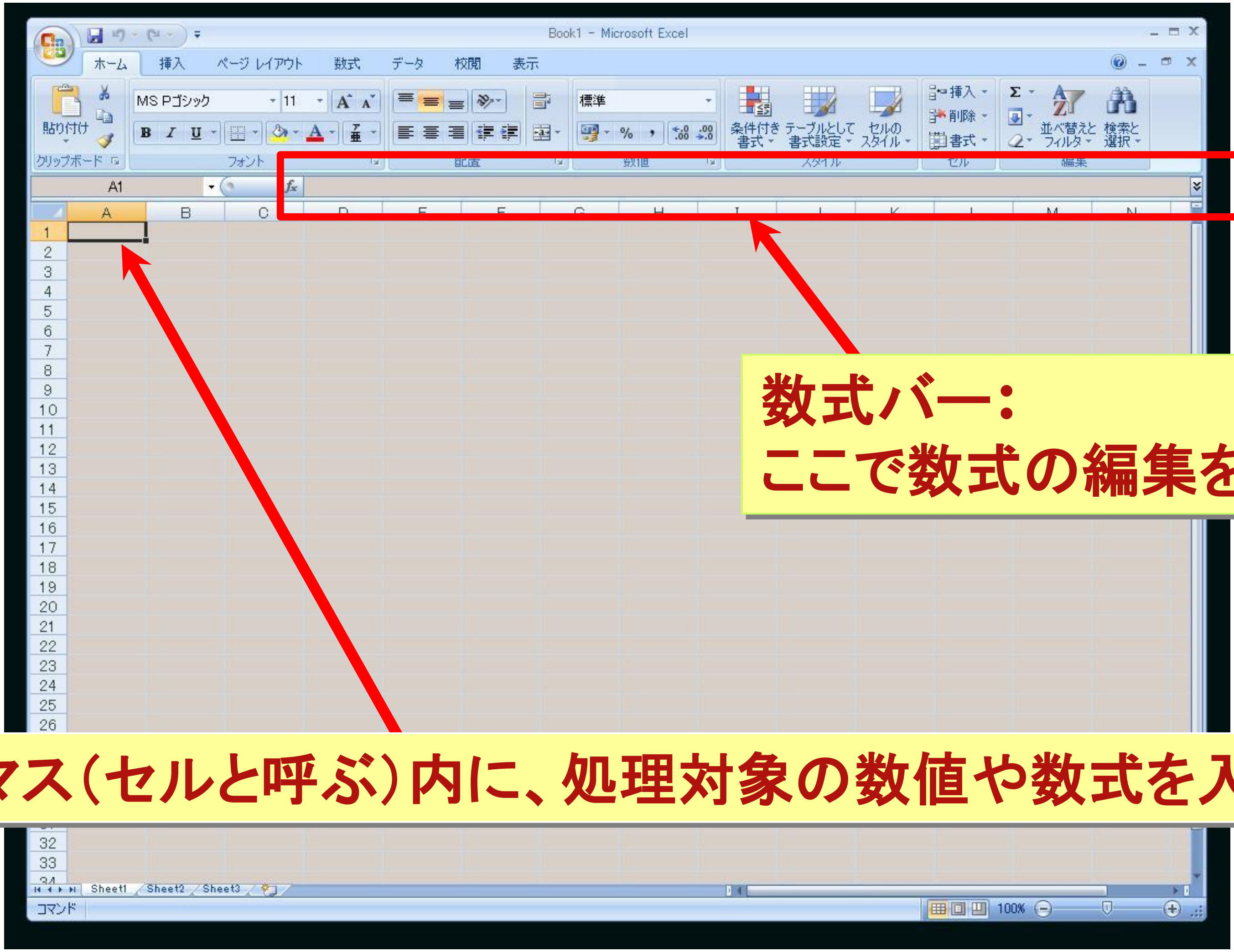
$$a = \frac{n\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i}{n\sum_{i=1}^{n} x_i^{\,2} - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}$$

$$b = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i^{\,2} \sum_{i=1}^{n} y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \sum_{i=1}^{n} x_i}{n\sum_{i=1}^{n} x_i^{\,2} - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}$$

表計算ツールの起動


Excel ファイル 編集 表示 挿入 書式 ツール データ ウインドウ ヘルプ
Excel ブック ギャラリー
オンラインおよびローカル テンプレートの検索
テンプレート
すべて
個人用テンプレート
グラフ用紙
その他の文書
ビジネスの必需品
ビジネス財務
個人財務
時間管理
オンライン テンプレ…
Excel ブック
10x10 方眼紙
5x5 方眼紙
標準方眼紙
Excel アドレス帳
最近のブック
すべて
今日
昨日
過去 1 週間
過去 1 か月
Excel を開くときに表示しない
キャンセル
選択
Mac 版の Excel は、起動後に
“Excel ブック” を選択

表計算の利用（1）

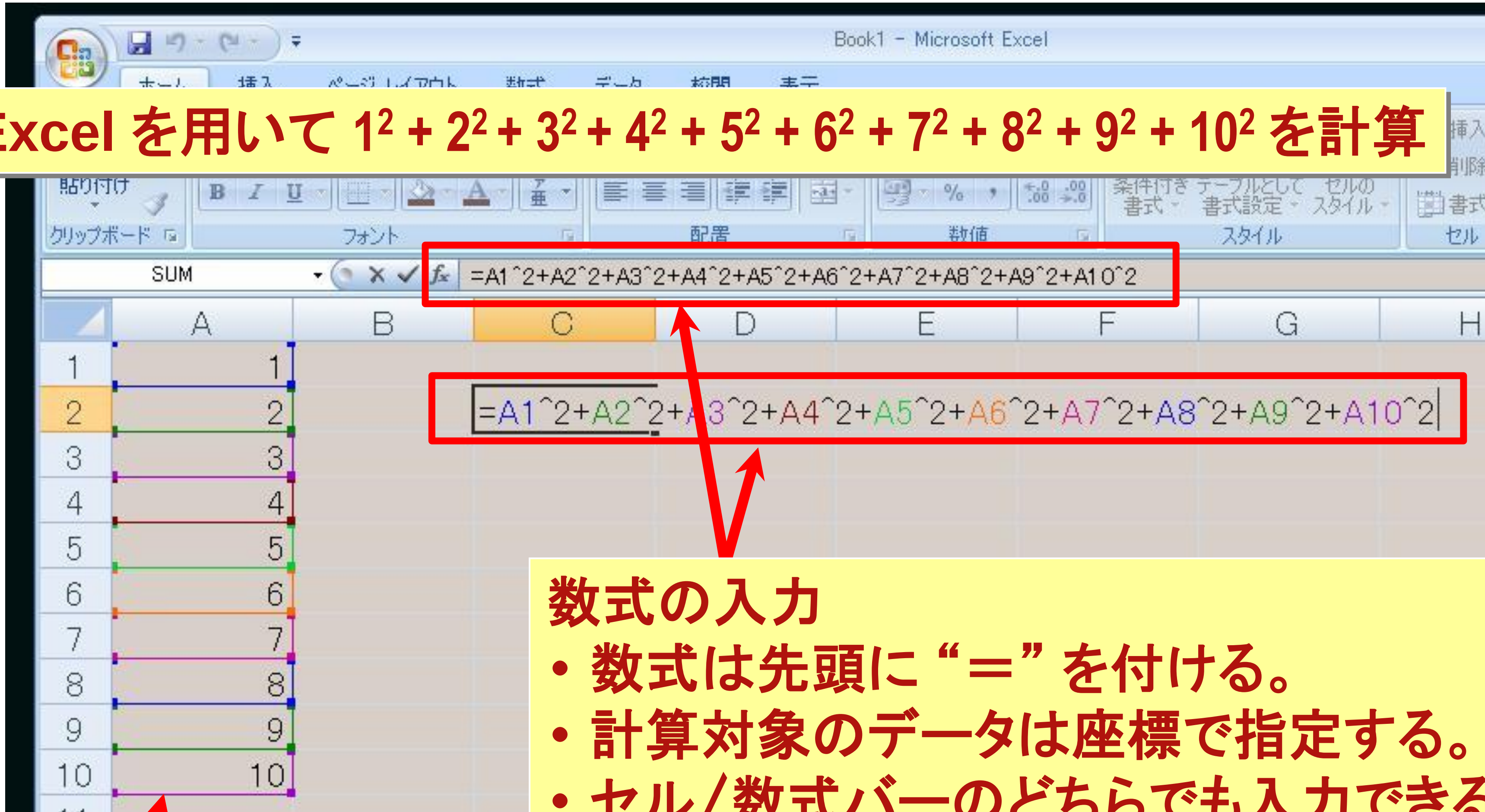


数式バー：
ここで数式の編集を行なう

このマス（セルと呼ぶ）内に、処理対象の数値や数式を入力

表計算の利用（2）

Excel を用いて $1^2 + 2^2 + 3^2 + 4^2 + 5^2 + 6^2 + 7^2 + 8^2 + 9^2 + 10^2$ を計算



数式の入力

- 数式は先頭に "＝" を付ける。
- 計算対象のデータは座標で指定する。
- セル/数式バーのどちらでも入力できる。

セルに処理対象の数値を入力

表計算の利用（3）

- 最小二乗法の係数を求めるには‥
  - 例えば a を求めるには、a の**各項毎に計算**し、**各計算結果をまとめる。**
  - 例えば、$n\sum x_i y_i$, $\sum x_i \sum y_i$ などをそれぞれ計算し、各計算結果から “**=（D1 – D2）/（D3 – D4^2）**” として求める。
    - 上の例では $n\sum x_i y_i$ などの計算結果（つまりは数式）を、D1 ～ D4 に入力したと仮定
- データが増えると、全てを座標で記述するのが面倒
  - Excel には、数式の記述を支援する関数が用意されている。
  - ∑を計算する関数: **SUM（開始座標, 終了座標）**
  - 他の関数については、Excel 用の書籍などを参照のこと。

演習

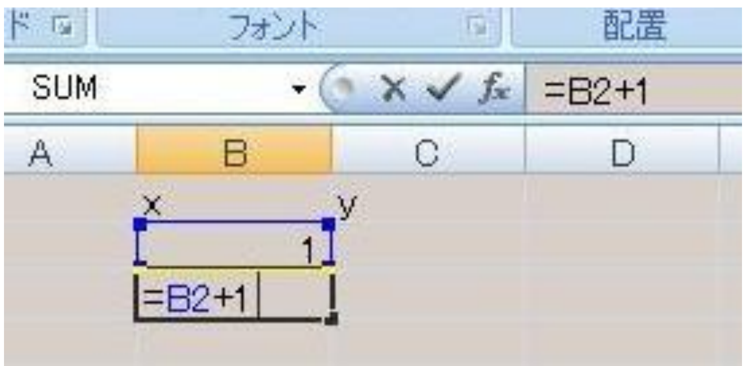
- $x_i = \{i\},\ y_i = \{i^2\}$ とした場合、

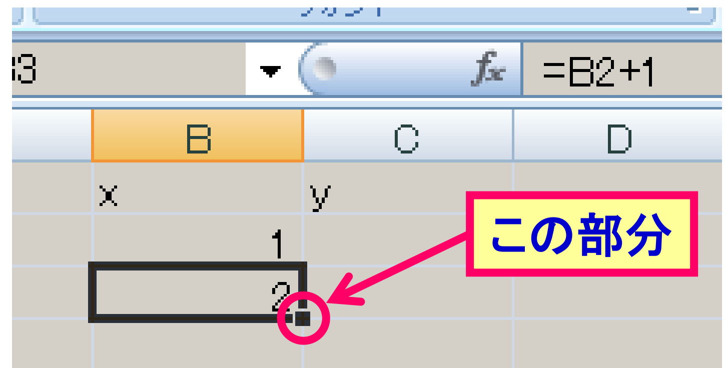
$$\sum_{i=1}^{20} x_i^2 + \sum_{i=1}^{20} x_i (y_i + 1) + \sum_{i=1}^{20} (y_i - 1)^2$$

を求めなさい。

Excel での実例（1）

表計算 ⇒ **計算対象となる数値をセルに入力**しておく必要がある。
大量の数値を入力するにはコピー機能の利用が便利

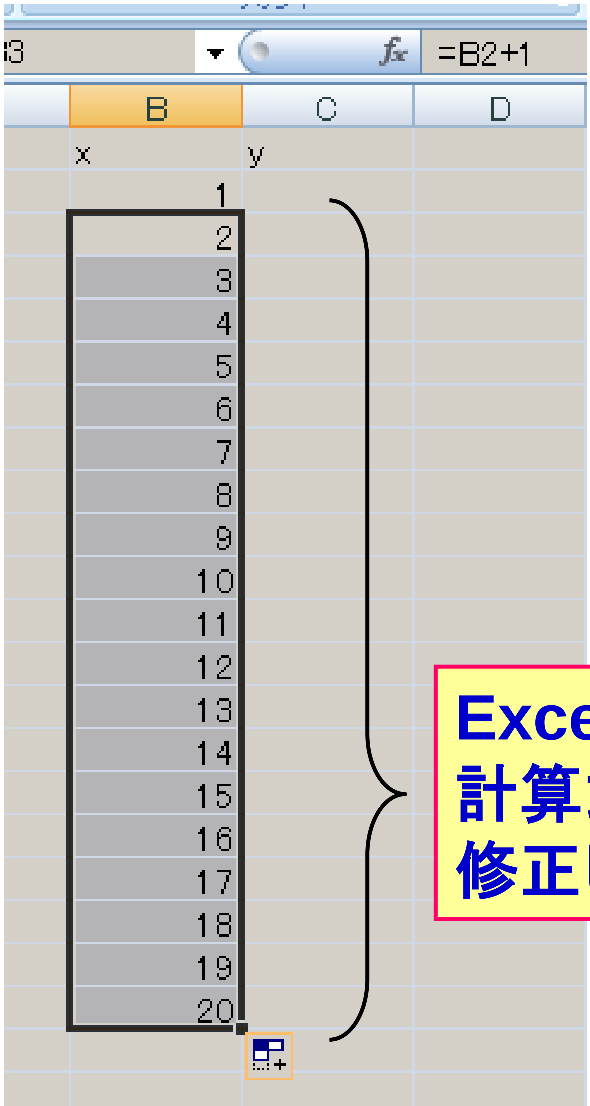




① まずは、*x* の初期値と
計算式を一つ入力

② 計算式のセルをクリックし、
右下隅のポイントをドラッグ

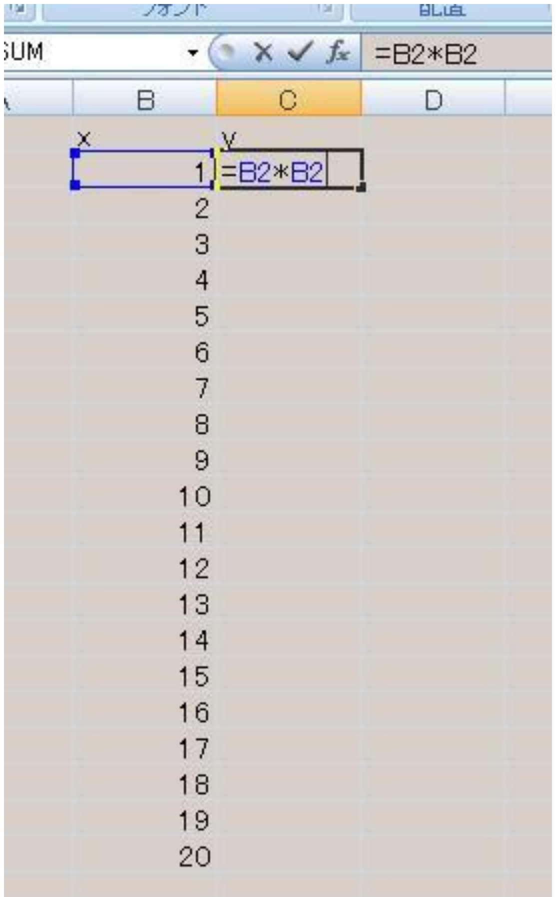
Excel での実例（2）

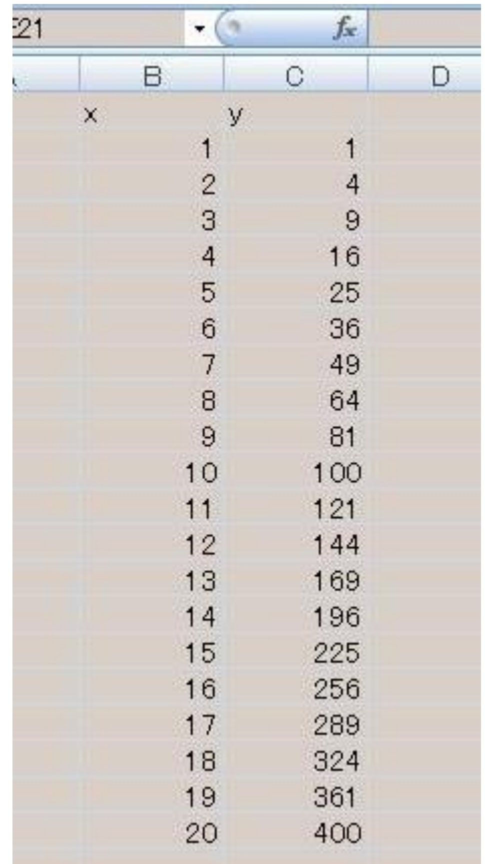


③ 必要なデータ数分をドラッグする。

Excel は、セルのコピー時に計算式内の座標を自動的に修正してくれる。

Excel での実例(3)





④ y の方も同様に
計算式を入力してコピーする。

⑤ x, y 両方の入力を終えたところ

Excel での実例（4）

B	C	D	E	F	G
x	y		x^2	x＊(y＋1)	(y－1)^2
1	1		1	2	0
2	4		4	10	9
3	9		9	30	64
4	16		16	68	225
5	25		25	130	576
6	36		36	222	1225
7	49		49	350	2304
8	64		64	520	3969
9	81		81	738	6400
10	100		100	1010	9801
11	121		121	1342	14400
12	144		144	1740	20449
13	169		169	2210	28224
14	196		196	2758	38025
15	225		225	3390	50176
16	256		256	4112	65025
17	289		289	4930	82944
18	324		324	5850	104329
19	361		361	6878	129600
20	400		400	8020	159201

⑥ x^2, $x \cdot (y+1)$, $(y-1)^2$ まで、全て入力する。

Excel での実例（5）

=SUM(G2:G21)

	B	C	D	E	F	G	H	I
	x	y		x^2	x * (y + 1)	(y − 1)^2		
	1	1		1	2	0		項1
	2	4		4	10	9		2870
	3	9		9	30	64		
	4	16		16	68	225		項2
	5	25		25	130	576		44310
	6	36		36	222	1225		
	7	49		49	350	2304		項3
	8	64		64	520	3969		=SUM(G2:G21)
	9	81		81	738	6400		
	10	100		100	1010	9801		
	11	121		121	1342	14400		
	12	144		144	1740	20449		
	13	169		169	2210	28224		
	14	196		196	2758	38025		
	15	225		225	3390	50176		
	16	256		256	4112	65025		
	17	289		289	4930	82944		
	18	324		324	5850	104329		
	19	361		361	6878	129600		
	20	400		400	8020	159201		

⑦ 目的の数式を適当なブロック（例えば項毎）に分け、各ブロック毎に計算式を入力する。この例では、

$$\sum_{i=1}^{20}(y_i - 1)^2$$

の計算式を入力したところ。

Excel での実例（6）

M | =I3+I6+I9

x	y	x^2	x＊(y＋1)	(y－1)^2
1	1	1	2	0
2	4	4	10	9
3	9	9	30	64
4	16	16	68	225
5	25	25	130	576
6	36	36	222	1225
7	49	49	350	2304
8	64	64	520	3969
9	81	81	738	6400
10	100	100	1010	9801
11	121	121	1342	14400
12	144	144	1740	20449
13	169	169	2210	28224
14	196	196	2758	38025
15	225	225	3390	50176
16	256	256	4112	65025
17	289	289	4930	82944
18	324	324	5850	104329
19	361	361	6878	129600
20	400	400	8020	159201

項1	2870
項2	44310
項3	716946
合計	=I3+I6+I9

⑧ 最後に、全ブロックを合算して解析結果を出す。

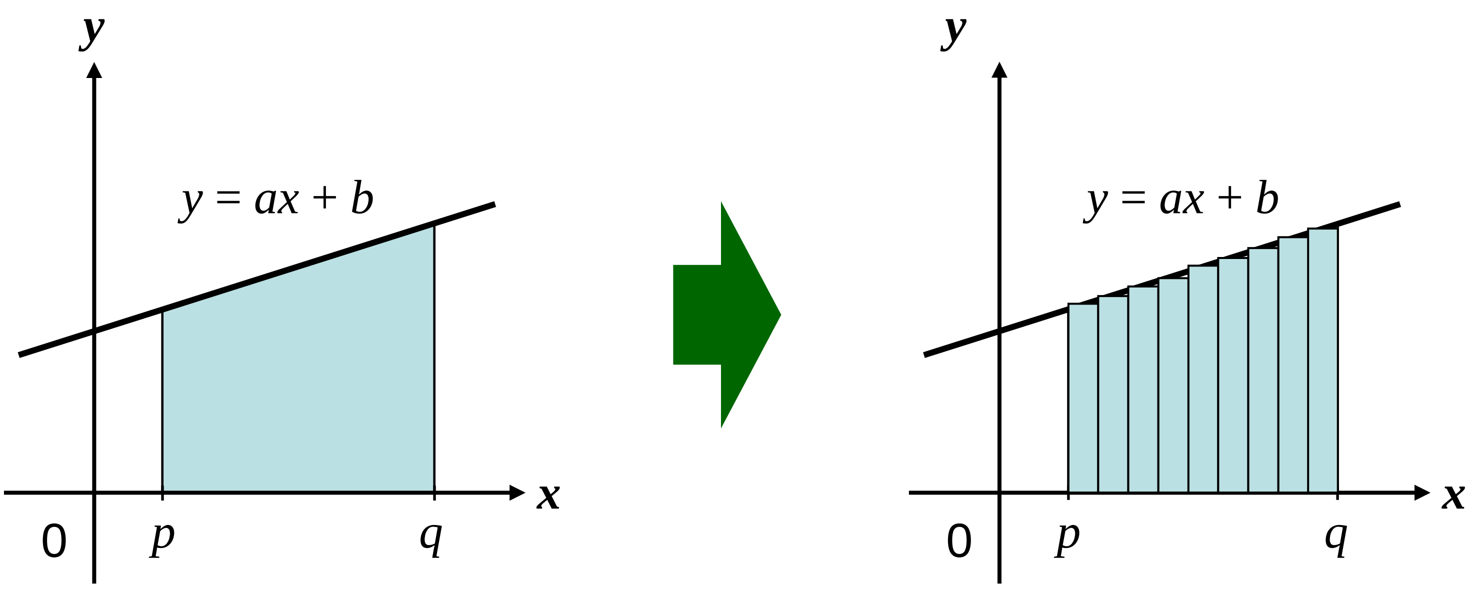
数値解析
（応用編）

定積分の考え方

- 例えば、次の積分計算を考える（左下図の水色の部分）。

$$\int_p^q ax+b\,dx=\left[\frac{a}{2}x^2+bx+c\right]_p^q=\frac{a}{2}q^2+bq+c-\left(\frac{a}{2}p^2+bp+c\right)$$

- 積分の意味を考えると、小さい矩形の集合に対して、極限を取ったもの（右下図）。



定積分の計算

- Excel を用いて積分計算をすることもできる。
- 具体的な手法は以下の通り。
  - 適当な列（例えば A1 ～ An）に、積分区間を n 等分した値を入力
  - A1 ~ An の値と被積分関数および積分区間/n より矩形の面積を求める（計算式を例えば B1 ～ Bn へ入力）。
    - **i 番目の矩形の面積 ＝ $F(\mathrm{Ai}) * [(q-p)/n]$**
  - **計算した n 個の矩形の面積（B1 ～ Bn）を全て加える。**
- 等分数 n を大きくしないと精度は高くならない。

微分方程式の計算（1）

- 数値解析の考え方：
  - 計算の簡単な線形式で近似し、少しだけ動かす。
- 簡単な微分方程式の解析にも利用できる。
  - どのようにやるのか、ちょっと見てみよう。
- 次の形をした微分方程式を満たす関数の形を調べる。

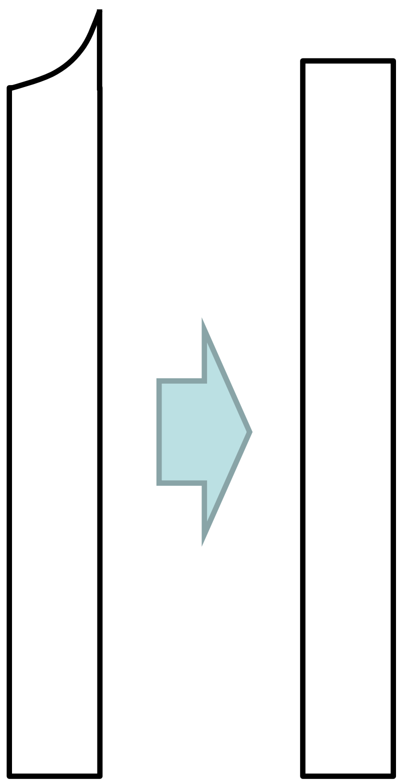
$$\frac{dy}{dx} = f(x, y)$$

以下の手法は、全ての微分方程式ではなく、左のような形に（接線の傾きとして）変形できるものが対象だと考えて下さい。

数値解析の考え方

【積分値の計算】

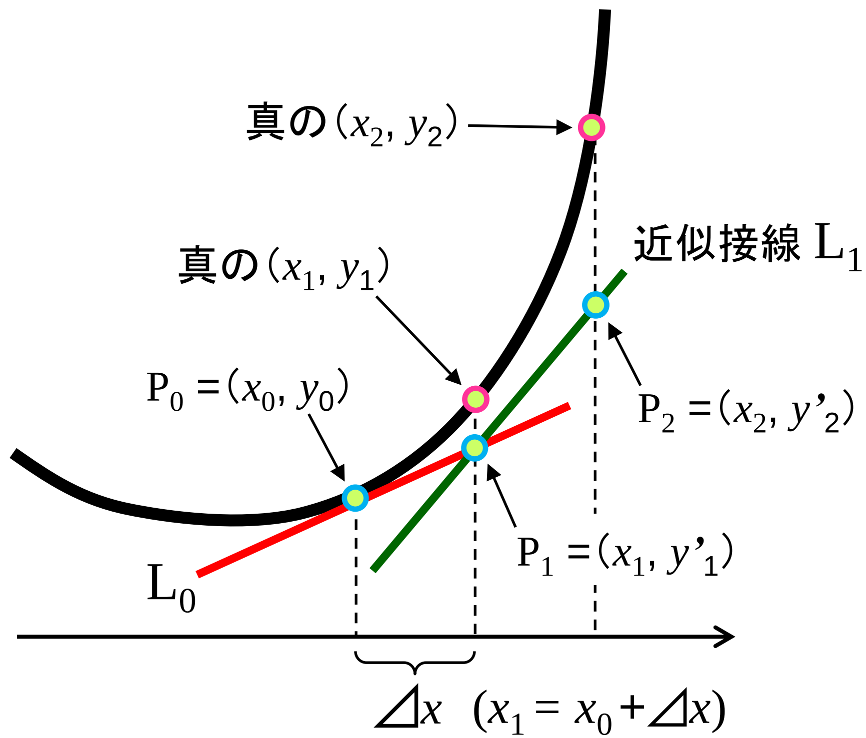
① 真の面積を、矩形で近似



x を少しだけ動かし、不明な計算を
簡単な計算（矩形の面積）で近似

【微分方程式の解】

① 真の (x_1, y_1) の値を、L_0 上の P_1 で近似
② P_2 の計算は、P_1 を通る近似接線 L_1 を利用



x を少しだけ動かし、不明な計算を
簡単な計算（近似接線 = 線形式）で近似

微分方程式の計算(2)

- 具体的な手法は以下の通り。

① 初期値を $P_0 = (x_0, y_0)$ とすると、**P_0 における接線**は
L_0: $y - y_0 = f(x_0, y_0) \cdot (x - x_0)$ と表わせる。

② x_0 から ⊿x だけ変化した **x_1 に対応する y_1 は、L_0 上にあると近似**し、$y'_1 = f(x_0, y_0) \cdot (x + \triangle x - x_0) + y_0$ より計算する。

- **y_1 の本当の値は、微分方程式の解である $f(x, y)$ から求めなければならないが、L_0 から近似的に求めてしまう(y'_1)のがミソ**

③ **$P_1 = (x_1, y'_1)$ を初期値として ① へ戻り、**
同様にして L_1 から近似値 $P_2 = (x_2, y'_2)$ を計算する。

④ **各座標 P_0 ～ P_n を結んだグラフは、$f(x, y)$ の近似となる。**

- ⊿x の値を小さくしないと精度は高くならない。

微分方程式の計算(3)

$\dfrac{dy}{dx} = x$ を初期値(2, 2)で解いてみよう。

初期値

	B	C	D
	x座標	y座標	⊿
P0	2.00	2.00	0.25
P1	2.25	2.50	
P2	2.50	3.06	
P3	2.75	3.69	
P4	3.00	4.38	
P5	3.25	5.13	
P6	3.50	5.94	
P7	3.75	6.81	
P8	4.00	7.75	
P9	4.25	8.75	
P10	4.50	9.81	
P11	4.75	10.94	
P12	5.00	12.13	
P13	5.25	13.38	
P14	5.50	14.69	

本来は、接線の傾きが入るので、
この部分もセルの計算式となるが、
今回は $dy/dx = x$ という形なので、
x の値を(セルを)そのまま使っている。

$y_{i+1} = f(x_i, y_i) \cdot (x_{i+1} - x_i) + y_i$

Excel では、

「$= \boxed{\mathbf{B}_{i-1}} * (\mathbf{B}_i - \mathbf{B}_{i-1}) + \mathbf{C}_{i-1}$」

$x_{i+1} = x_i + \triangle x$

Excel では

「$= \mathbf{B}_{i-1} + \mathbf{D}_2$」

微分方程式の計算(4)

$\frac{dy}{dx} = x$ を初期値(2, 2)で解いてみよう。