# 物理学情報処理演習

## １１. 数値計算

### 数値計算

連立１次方程式の解法

### データ処理

最小二乗法

参考文献

Numerical Recipes in C

W. H. Press他著　　技術評論社

Advanced Engineering Mathematics

Erwin Keryszig　　John Wiley & Sons, Inc.

大久保晋

E-mail: buturi-johoshori@tiger.kobe-u.ac.jp

http://extreme.phys.sci.kobe-u.ac.jp/staffs/okubo/lectures/Programming/index.html

# 連立１次方程式の解法

N個の未知数$x_j$ (j=1, 2, …. , N) に対して、M個の方程式

$$a_{11}\cdot x_1 + a_{12}\cdot x_2 + \cdots\cdots + a_{1N}\cdot x_N = b_1$$

$$a_{21}\cdot x_1 + a_{22}\cdot x_2 + \cdots\cdots + a_{2N}\cdot x_N = b_2$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$a_{M1}\cdot x_1 + a_{M2}\cdot x_2 + \cdots\cdots + a_{MN}\cdot x_N = b_M$$

があるとき、その解を求めることを考えよう。

ここで、$a_{ij}$, $b_j$ は既知の数である。

これらの方程式は、行列・ベクトルを用いると

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

と書き表すことができる。

これらM個の方程式の内、N個が線形独立なら（変数の数Nと同じか以下ならば）、解が一意に定まる。

# 連立１次方程式の解法

行列Aの逆行列$A^{-1}$は

$$\mathbf{A}\cdot\mathbf{A}^{-1}=\mathbf{A}^{-1}\cdot\mathbf{A}=\mathbf{I}$$

（Iは単位行列）となる。これを用いると解は

$$\mathbf{x}=\mathbf{A}^{-1}\cdot\mathbf{b}$$

と書き表される。

また、逆行列$A^{-1}$のI列目のベクトルを$e^{(i)}$とすると、

$e^{(i)}$は方程式

$$\mathbf{A}\cdot\mathbf{x}=\mathbf{e}^{(\mathbf{i})}$$

$$\mathbf{e}_j^{(i)}=\delta_{ij}$$

の解となる。

以下では、簡単のためN=3として話を進めていく。

# 連立１次方程式の解法：Gauss-Jordan法

Gauss-Jordan法を行列・ベクトルを用いて解く際に、行列式は以下の操作に普遍である性質を使う

1. 任意の２行の入れ替え
2. 任意の行を、その行と別の行の線形接合での置き換え

# 連立１次方程式の解法：Gauss-Jordan法

Gauss-Jordan法は、いわゆる中学の連立１次方程式の解法。
次の連立一次方程式を考える。

$$a_{11}\cdot x_1 + a_{12}\cdot x_2 + a_{13}\cdot x_3 = b_1 \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (1)$$

$$a_{21}\cdot x_1 + a_{22}\cdot x_2 + a_{23}\cdot x_3 = b_2 \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (2)$$

$$a_{31}\cdot x_1 + a_{32}\cdot x_2 + a_{33}\cdot x_3 = b_3 \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (3)$$

(1)式を$a_{11}$で割り、$x_1$の係数を１にする。
(2)式から(1)式を$a_{21}$倍したものを引く。
(3)式から(1)式を$a_{31}$倍したものを引く。
すると次のように(2)式、(3)式の$x_1$の係数は０になる。

$$x_1 + a'_{12}\cdot x_2 + a'_{13}\cdot x_3 = b'_1 \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (1)'$$

$$a'_{22}\cdot x_2 + a'_{23}\cdot x_3 = b'_2 \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (2)'$$

$$a'_{32}\cdot x_2 + a'_{33}\cdot x_3 = b'_3 \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (3)'$$

# 連立１次方程式の解法：Gauss-Jordan法

同様に

(1)’を$a_{22}$’で割る。

$a_{22}$’を(2)’にかけて(1)’から引く

$a_{32}$’を(2)’にかけて(3)’から引く

$$x_1 + a''_{13} \cdot x_3 = b''_1 \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (1)''$$

$$x_2 + a''_{23} \cdot x_3 = b''_2 \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (2)''$$

さらに

$$a''_{33} \cdot x_3 = b''_3 \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (3)''$$

(3)’’を$a_{33}$’’で割る

$a_{13}$’’を(3)’’にかけて(1)’’から引く

$a_{23}$’’を(3)’’にかけて(3)’’から引く

$$x_1 = b'''_1 \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (1)'''$$

$$x_2 = b'''_2 \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (2)'''$$

$$x_3 = b'''_3 \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (3)'''$$

# 連立１次方程式の解法：Gauss-Jordan法

これで、

$$x_1 = b_1''' \qquad x_2 = b_2''' \qquad x_3 = b_3'''$$

と解が求められた。

上記の連立方程式はbを右辺に移行して以下のA・x=bの行列式のようにも表せる

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} y_{11} & y_{12} & y_{13} & x_1 \\ y_{21} & y_{22} & y_{23} & x_2 \\ y_{31} & y_{32} & y_{33} & x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & b_1 \\ 0 & 1 & 0 & b_2 \\ 0 & 0 & 1 & b_3 \end{bmatrix}$$

ここで、

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \qquad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$$

この解を求めれば、

**x**(=$x_j$)は、 **A・x=b** の解

**Y**(=$y_{ij}$)は、Aの逆行列　　　となる。

# 連立１次方程式の解法：Gauss-Jordan法

実際のプログラムは、次のような係数行列を作り、これが単位行列になるように掃き出し演算を行う。

$$
\begin{array}{ccccc}
\boxed{a_{11}} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\
a_{21} & \boxed{a_{22}} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
a_{n1} & a_{n2} & \cdots & \boxed{a_{nn}} & b_n
\end{array}
\xrightarrow{\text{掃き出し}}
\begin{array}{cccc}
1 & 0 & & 0 \\
0 & 1 & & 0 \\
 & & \ddots & \\
0 & 0 & & 1
\end{array}
\underset{\text{解}}{\boxed{\begin{array}{c} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_n \end{array}}}
$$

ピボット

## アルゴリズムは以下の通り

ピボットを１行１列からn行n列に移しながら以下を繰り返す。

a. ピボットのある行の要素($a_{k\,k}$, $a_{k\,k+1}$, …, $a_{k\,n}$, $b_k$)をピボット係数($a_{k\,k}$)で割る。結果としてピボットは１となる。なおピボット以前の要素($a_{k\,1}$, $a_{k\,2}$, …, $a_{k\,k-1}$)はすでに０になっているので割らなくてもよい。

b. ピボット行以外の各行について以下を繰り返す。

I. (各行)ー(ピボット行) x (係数)。この操作もピボット以前の列要素についてはすでに０になっているので行わなくても良い。

# 演習１１－１：Gauss-Jordan法

次の連立１次方程式を解いてみよう

$$2x_1 + 3x_2 + 1x_3 = 4$$
$$4x_1 + x_2 - 3x_3 = -2$$
$$-x_1 + 2x_2 + 2x_3 = 2$$

これを先の行列で表すと

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & b_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 3 & 1 & 4 \\ 4 & 1 & -3 & -2 \\ -1 & 2 & 2 & 2 \end{bmatrix}$$

これをGauss-Jordan法で解くプログラムを作成せよ。

解は

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \\ 3 \end{bmatrix}$$

# 演習１１−１：Gauss-Jordan法

## Gauss-Jordan法の見本プログラム 11-1.c

```
#include <stdio.h>
#define N 3    /* 3x3 matrix */

int main(void){
  static double a[N][N+1] = {{2.0, 3.0, 1.0,
4.0}, {4.0, 1.0, -3.0, -2.0}, {-1.0, 2.0, 2.0,
2.0}};

  double p, d;
  int i, j, k;

  for (k=0; k<N; k++){
    p = a[k][k];    /* pivot coefficient */
    for (j=k; j<N+1; j++){
      a[k][j]=a[k][j]/p;      /* substract pivot gyou
by p */
    }
    for (i=0; i<N; i++){    /* pivot sweep out */
      if (i!=k){
        d = a[i][k];
        for (j=k; j<N+1; j++){
          a[i][j]=a[i][j]-d*a[k][j];
        }
      }
    }
  }

  for (k=0; k<N; k++){
    printf("x%d=%f¥n", k+1, a[k][N]);
  }

  return (0);
}
```

各成分をピボットで割る

| 2/2 | 3/3 | 1/2 | 4/2 |
|---|---|---|---|

次(次々)の行のピボット列の値

次(次々)の行の各成分からdxピボット

# 連立１次方程式の解法

連立方程式の解法として以下のものがある。

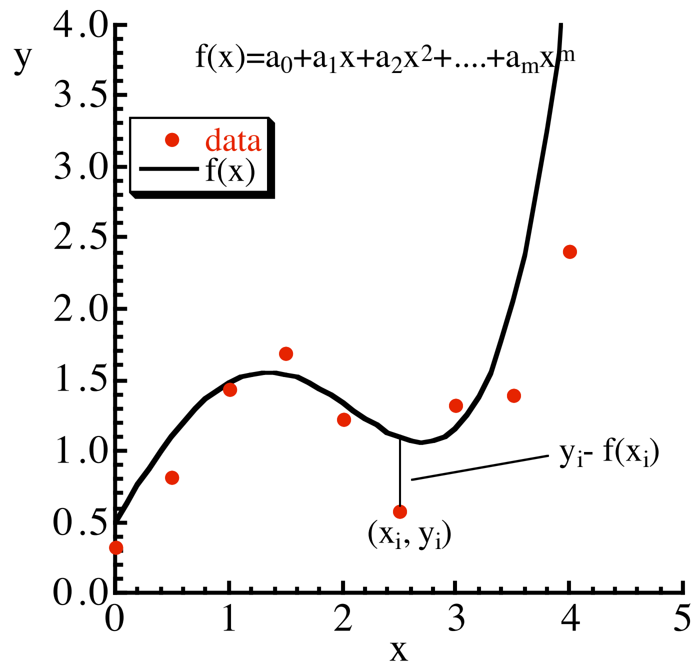
- Gauss-Jordan法（ガウス・ジョルダン法）
- Gaussの消去法（ガウスの消去法）
- Gauss-Seidel法（ガウス・サイデル法）
- 共役傾斜法
- Cholesky法（コレスキー法）
- Crout法（クラウト法）

これらについては、参考図書

「Numerical Recipes in C」W. H. Press他著　技術評論社

を参考のこと

# 最小二乗法




データ点が与えられているとき、データ点を最も再現する理論式f(x)を求める方法。

理論式$f(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+\ldots+a_mx^m$とデータ点$(x_i, y_i)$との距離は

$$\left(y_i - f(x_i)\right)^2$$

である。したがって各点での総和は

$$I(a_0,a_1,\ldots,a_m) = \sum_i \left(y_i - f(x_i)\right)^2 = \sum_i \left\{ y_i - \left(a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^{\ 2} + \cdots + a_i x^m\right)^2 \right\}$$

この$I(a_0,a_1,\ldots,a_m)$ を最小にする係数の組$(a_0, a_1, \ldots, a_m)$を求めることは、$I$を$(a_0, a_1, \ldots, a_m)$の関数として見て、この関数の最小値を求める問題である。関数の最小値は変数の微分がゼロになる点であるから

$$\frac{\partial I(a_0,a_1,\ldots,a_m)}{\partial a_i} = 0$$

を満足すればよい。したがって、係数の組を変数としたm個の連立方程式の解を求める問題に帰着する。

# 最小二乗法

m個のデータ点$(x_i, y_i)$を一次式の理論式$f(x)=a_0+a_1x$にフィットさせることを考えよう。

理論式$f(x)=a_0+a_1x$とデータ点$(x_i, y_i)$との距離の総和は

$$I(a_0,a_1) = \sum_i \left(y_i - f(x_i)\right)^2 = \sum_i \left\{y_i - \left(a_0 + a_1 x_i\right)^2\right\}$$

$$= \sum_{i=1}^{m} \left\{\left(y_i - a_0\right)^2 - 2a_1\left(y_i - a_0\right)x_i + a_1^2 x_i^2\right\}$$

この$I(a_0,a_1)$ は係数$(a_0, a_1)$の２次式である。この$I$の最小値は２次式の極値であるから微分がゼロであることから

$$\frac{\partial I(a_0,a_1)}{\partial a_0} = 0 \qquad \frac{\partial I(a_0,a_1)}{\partial a_1} = 0$$

を満たす$a_0, a_1$を求めればよい。

# 最小二乗法：

$$\frac{\partial I(a_0,a_1)}{\partial a_0} = ma_0 + \left(\sum_i x_i\right)a_1 - \sum_i y_i = 0$$

$$\frac{\partial I(a_0,a_1)}{\partial a_1} = a_0\sum_i x_i + a_1\sum_i x_i^2 - \sum_i x_i y_i = 0$$

であるから、理論式f(x)=$a_0$+$a_1$x の$a_0$, $a_1$は

$$a_0 = \frac{\sum_i y_i \sum_i x_i^2 - \sum_i x_i \sum_i x_i y_i}{m\sum_i x_i^2 - \left(\sum_i x_i\right)^2} \qquad a_1 = \frac{m\sum_i x_i y_i - \sum_i x_i \sum_i y_i}{m\sum_i x_i^2 - \left(\sum_i x_i\right)^2}$$

となる。

# 最小二乗法

より一般的なn次多項式 $f(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+\ldots+a_mx^m$ を用いても、n次指数関数の多項式 $f(x)= a_0+a_1e+a_2e^2+\ldots+a_me^m$ を用いても二乗差

$$\left(y_i - f(x_i)\right)^2$$

は係数の組$(a_0, a_1, \ldots, a_m)$の２次関数である。したがって、

$$\frac{\partial I(a_0, a_1, \ldots, a_m)}{\partial a_i} = 0$$

は１次方程式である。$a_i$が0〜mまであるので、m+1の連立１次方程式を解くことになる。

連立１次方程式の解法は、前出のGauss-Jordan法で解けばよい。

# 演習１１－２：最小二乗法（1次）

Excelを使って右の11個のデータ点を最小二乗法で直線に近似し、その係数a0, a1を求めよ。

さらに、近似した直線との誤差の平均、誤差の標準偏差を求めよ。

| x | y |
| --- | --- |
| 0.0000 | -0.27832 |
| 1.0000 | 3.3703 |
| 2.0000 | 3.7018 |
| 3.0000 | 4.7366 |
| 4.0000 | 7.6784 |
| 5.0000 | 12.226 |
| 6.0000 | 13.992 |
| 7.0000 | 18.176 |
| 8.0000 | 22.618 |
| 9.0000 | 25.301 |
| 10.000 | 28.685 |

a0, a1は

$$a_0 = \frac{\sum_i y_i \sum_i x_i^2 - \sum_i x_i \sum_i x_i y_i}{m\sum_i x_i^2 - \left(\sum_i x_i\right)^2} \qquad a_1 = \frac{m\sum_i x_i y_i - \sum_i x_i \sum_i y_i}{m\sum_i x_i^2 - \left(\sum_i x_i\right)^2}$$

であり誤差平均、標準偏差は次の式で与えられる。

$$\overline{error} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f(x_i) - y_i \qquad \sigma_{error} = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(f(x_i) - y_i\right)^2}$$

ここで、$f(x_i)$は求めたfitting 関数f(x)=a0+a1*xである。

# 演習１１－２：最小二乗法（1次）

直線近似した結果は右図のようになる

解は以下の通り

a0= -1.9105,  a1= 2.9314,

error=0.00018666, $\sigma_{error}$= 0.44734