物理学情報処理演習
12. データ処理

2016年7月5日
VER20160705

本日の推奨作業directory

lesson12

12.1 連立一次方程式

12.2 最小二乗法

参考文献

・やさしいC++ 第4版 高橋 麻奈 (著)
ソフトバンククリエイティブ

・プログラミング言語C++第4版
ビャーネ・ストラウストラップ, Bjarne Stroustrup, 柴田 望洋

・ Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing, Third Edition in C++

身内賢太朗

レポート提出：fsci-phys-jouhou@edu.kobe-u.ac.jp

12.1 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・ザイデル法）
- 共役傾斜法
- Cholesky法（コレスキー法）
- Crout法（クラウト法）

N 個の未知数x_j（j=1，2，…．，N）に対して、M 個の方程式

$$a_{11}\cdot x_1 + a_{12}\cdot x_2 + \cdots\cdots + a_{1N}\cdot x_N = b_1$$
$$a_{21}\cdot x_1 + a_{22}\cdot x_2 + \cdots\cdots + a_{2N}\cdot x_N = b_2$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$
$$a_{M1}\cdot x_1 + a_{M2}\cdot x_2 + \cdots\cdots + a_{MN}\cdot x_N = b_M$$

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、それ以下ならば）、解が一意に定まる。

行列$\mathbf{A}$の逆行列$\mathbf{A}^{-1}$は

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

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

$\boldsymbol{e}^{(i)}$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

方程式を行列・ベクトルを用いてGauss-Jordan法で解く際に、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行を入れ替える。
2. 任意の行をその行と別の行の線形接合で置き換える。

連立1次方程式の解法:Gauss-Jordan法

Gauss-Jordan法は、いわゆる消去法による連立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((1)’)。
(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

(2)’をa_{22}’で割る（(2)”）。

a_{12}’を(2)”にかけて(1)’から引く

a_{32}’を(2)”にかけて(3)’から引く

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

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

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

さらに

(3)”をa_{33}”で割る（(3)’’’）。

a_{13}”を(3)’’’にかけて(1)”から引く

a_{23}”を(3)’’’にかけて(2)”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、以下のようにも表せる；

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

ここで、

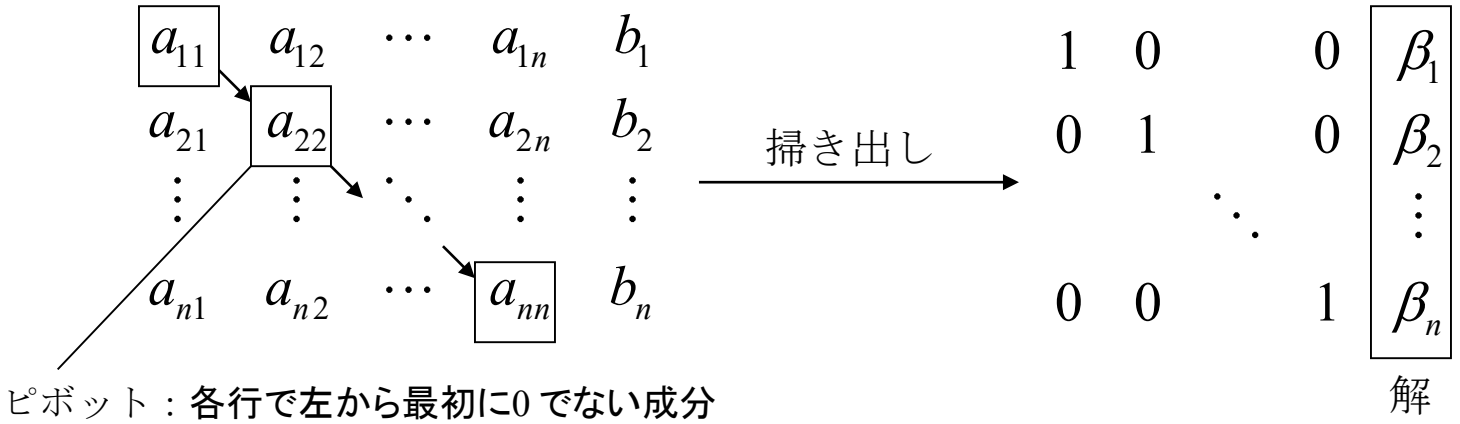
$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$$

x(=x_j)は、 **A・x=b** の解

Y(=y_{ij})は、**A**の逆行列　　である。

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。



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。

1. ピボットのある行の要素($a_{k\,k}, a_{k\,k+1}, \ldots, a_{k\,n}, b_k$)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($a_{k\,1}, a_{k\,2}, \ldots, a_{k\,k-1}$)はすでに０。
2. ピボット行以外の各行について以下を繰り返す。

（各行)ー(ピボット行）x（係数)。なお、この操作について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。

Gauss−Jordan法の実例

次の連立１次方程式を解く実例

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

これを先の行列で表すと

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

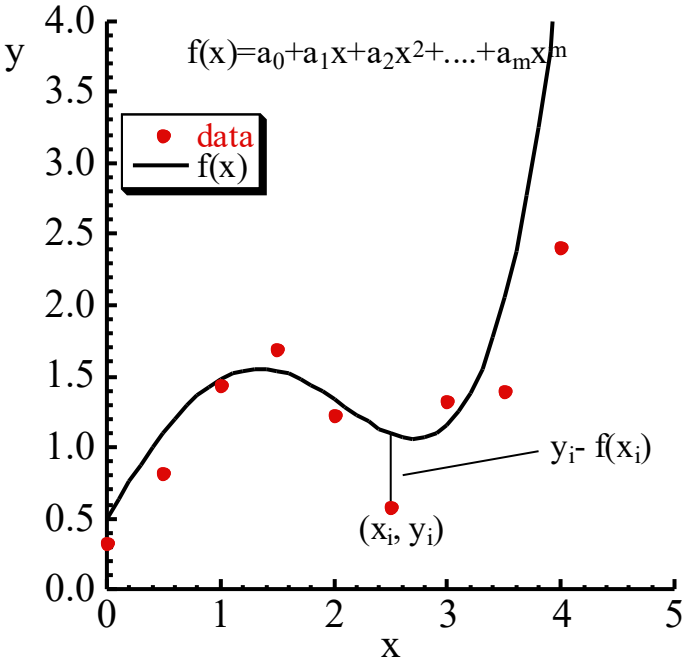
4ren_1.cxx

```
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include <stdlib.h>
#include <string.h>
#include <math.h>
using namespace std;
#define N 3    // 3x3 matrix
int main(int argc, char *argv[] ){
 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++){
    cout << "x" << k+1<<"="<<a[k][N]<<endl;
  }
 }
 return 0;
}
```

係数の定義

ピボットで割る

12.2 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)との距離の2乗は、

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

である。したがって各点でのそれらの総和Iは、

$$I(a_0,a_1,\ldots,a_m)=\sum_i\left(y_i - f(x_i)\right)^2=\sum_i\left\{y_i-\left(a_0+a_1x_i+a_2x_i^{\,2}+\cdots+a_ix^m\right)^2\right\}$$

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。

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

理論式$f(x)=a_0+a_1x$とデータ点(x_i, y_i)との距離の2乗の総和は

$$I(a_0,a_1)=\sum_i\left(y_i-f(x_i)\right)^2=\sum_i\left\{y_i-\left(a_0+a_1x_i\right)\right\}^2$$

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

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各係数による微分がゼロである。よって、

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

を満たすa_0, a_1を求めればよい。

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

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

より理論式$f(x)=a_0+a_1x$ 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。

レポート提出：fsci-phys-jouhou@edu.kobe-u.ac.jp
提出期限　2016年7月12日13:00

ソースコードファイル名：2016_jouhou_12_学籍番号の下4桁.cxx
出力画像ファイル名：2016_jouhou_12_学籍番号の下4桁.pdf

課題12：物理実験データに関して、以下の解析を行え。

① data.datを最小二乗法を用いて、直線でフィットせよ。読み込みに関しては input.cxxと第7講を参照のこと。
（f(x)= 3.2+2.7x 程度となるはず）

② 上記データには、測定値y_iについて測定誤差σ_iがあることが分かっている。このデータを含んだデータdata_e.datについてカイ2乗を計算、切片および傾きを1%ステップで±100%程度スキャンし(2重+1重ループとする必要あり)、カイ2乗が最小になる直線を求めよ。ただしカイ2乗は以下のように定義される。

$$\chi^2 = \sum \left(\frac{f(x_i) - y_i}{\sigma_i} \right)^2$$

③ data_e.dat、①で求めた直線、②で求めた直線を重ね書きせよ。deta_e.datに関しては、plot “data_e.dat” using 1:2:3 with errorbars でエラー付き表示が可能。