

第IV部

数学基礎 - 中級編

第7章 最適化

計算が進むと、内容もプログラムも複雑になります。この章あたりから、前章で説明したスクリプトファイルを利用した方が便利でしょう。

7.1 ラグランジュ未定乗数法

7.1.1 ラグランジュ未定乗数法の定式化

束縛条件 $g(x, y) = 0$ のもとで、 $f(x, y)$ が最大値となる点 (a, b) を求める問題を考えてみましょう。そのためには、新たな変数 λ (ラグランジュ乗数と呼びます) を導入して、

$$F(x, y, \lambda) = f(x, y) - \lambda g(x, y)$$

を考えます。点 (a, b) で $\partial g/\partial x \neq 0$, $\partial g/\partial y \neq 0$ ならば、

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \frac{\partial F}{\partial y} = \frac{\partial F}{\partial \lambda} = 0 \quad (7.1)$$

により $\lambda = \alpha$ および最大値を与える点 (a, b) が決まります。

7.1.2 典型的問題と解法

【問題】

$$f(x, y) = (x + y)^2 \quad (7.2a)$$

$$g(x, y) = x^2 + y^2 - 1 \quad (7.2b)$$

として、束縛条件 $g(x, y) = 0$ のもとで $f(x, y)$ の最適解を求めよ。

【解】

$$F(x, y, \lambda) = f(x, y) - \lambda g(x, y) \quad (7.3)$$

と置いて、ラグランジュ未定乗数法の条件から

$$(1 - \lambda)x + y = 0 \quad (7.4a)$$

$$x + (1 - \lambda)y = 0 \quad (7.4b)$$

$$x^2 + y^2 = 1 \quad (7.4c)$$

が得られます。これを解いて、 $\lambda = 2$ 又は 0 を得ます。この λ を用いれば以下のような結果が得られます。

$$\lambda = 2 \text{ のとき} \quad x = y = \pm \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad f = 2 \quad (7.5a)$$

$$\lambda = 0 \text{ のとき} \quad x = -y = \pm \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad f = 0 \quad (7.5b)$$

7.1.3 MATLAB の利用

これを MATLAB で解いてみましょう (図 7.1)

```

syms x y lambda f(x,y) g(x,y) real
% maximize
f(x,y) = (x+y)^2;
% subject to
g(x,y) = x^2 + y ^2 - 1;
L(x,y,lambda) = f - lambda*g
eqn1 = diff(L,x) == 0;
eqn2 = diff(L,y) == 0;
eqn3 = diff(L,lambda) == 0;
ss = solve([eqn1,eqn2,eqn3],[x,y,lambda]);
ss.x
ss.y
ss.lambda
f(ss.x,ss.y)
T =
table(double(ss.x),double(ss.y),double(ss.la
mbda),double(f(ss.x,ss.y)));
T.Properties.VariableNames =
{'x','y','lambda','f'}

```

```

>> LagrangeMultiplier
L(x, y, lambda) =
(x + y)^2 - lambda*(x^2 + y^2 - 1)
ans =
 2^(1/2)/2
-2^(1/2)/2
-2^(1/2)/2
 2^(1/2)/2
ans =
-2^(1/2)/2
 2^(1/2)/2
-2^(1/2)/2
 2^(1/2)/2
ans =
0
0
2
2
ans =
0
0
2
2

```

```

T =
4 × 4 table
   x         y     lambda     f
   _____
0.70711 -0.70711     0     0
-0.70711  0.70711     0     0
-0.70711 -0.70711     2     2
 0.70711  0.70711     2     2

```

図 7.1: Lagrange 未定乗数法 . (左) プログラムファイル , (中) (右) 出力結果 .

- %に続く行はコメント行です .

- `ss=...` では, `solve` コマンドを用いて, 数式 `eqn1 ~ eqn3` を変数 `x`, `y`, `lambda` について解き, その解を縦ベクトル `ss.x`, `ss.y`, `ss.lambda` に格納. ここで作られる `ss` は構造体と呼ばれる. ここでは行列形式になっている.
- プログラムの中でデータ `ss.x` `ss.y` `ss.lambda` がどう入っているか, `f` に何が入っているか確認している. その答えが中央の4つの `ans=...` に対応する.
- `double(ss.x)` 等でシンボリック変数を倍精度数値 (`double`) に変換し, `T=table(...)` で table `T` を定義する. セミコロンがあるから結果は出力されない.
- `T.Properties.VariableNames = {'x','y','lambda','f'}` では, table プロパティ `VariableNames` (変数名) を変更して, table 内の各変数の変数名を指定する. その出力が右.

7.2 線形計画法

一般的な関数 (目的関数) の大域的な最小値または最大値 (とパラメータ空間の場所) を探す問題は, 現在は数学としても (非) 線形計画問題として大きな分野を形成しています.

7.2.1 線形計画法とは

線形計画問題とは, 目的関数と制約条件がすべて, 値を定めるべき変数について線形の最適化問題のことをいいます. 変数が2つ $x_1 (\geq 0)$, $x_2 (\geq 0)$ の場合に一般的に書けば, 不等式条件

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 \leq b_1, \quad (7.6a)$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 \leq b_2 \quad (7.6b)$$

の制約 (2次元空間内で (x_1, x_2) の領域を決める) の下で

$$c_1x_1 + c_2x_2 \quad (7.7)$$

の最大値およびそのときの x_1, x_2 を求める問題です.

目的関数が線形なので，局所的な解は大域的な意味でも最適解になります．さらに目的関数も線形ですから，最適解は (x_1, x_2) 平面内の凸多角体の境界上に存在するはずで

7.2.2 線形計画法の問題と考え方

[問題]:

$4x + 2y \leq 30, x + 3y \leq 14$ の制約条件の下で

目的関数 $f(x, y) = -5x - 4y$ を最小化せよ (図 7.2) .

[考え方]:

領域 $4x + 2y \leq 30, x + 3y \leq 14$ のをグラフ上に描き， $f(x, y) = -5x - 4y =$ 一定の直線をいろいろ描いてみると，すぐに解答が見つかるでしょう．図 7.2 に解答を示してみましよう．

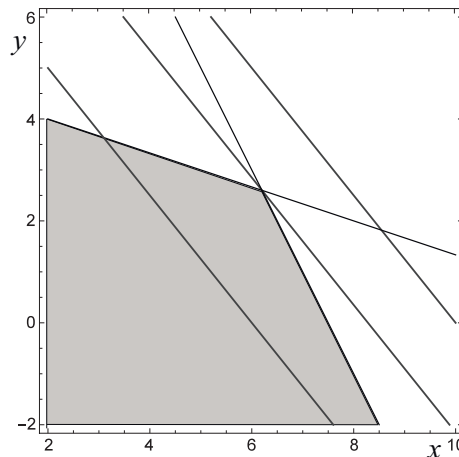


図 7.2: 線形計画問題の例．制約条件 $4x + 2y \leq 30, x + 3y \leq 14$ の下で，目的関数 $f(x, y) = -5x - 4y$ を最小化する．グレー部分が制約条件で指定された領域．並行した直線は $f(x, y) = -30, -207/5, -50$ の等高線． $x = 31/5, y = 13/5$ で最小値 $a = -207/5$ をとる．図から見て取れるように，最適値をとる場所は，領域の端，2つの直線の交点となる．

7.2.3 MATLAB の利用

MATLAB には線形計画法のルーチン $\text{linprog}(f, A, b)$ が用意されています．ここで A は行列， f, b はベクトルです (図 7.3) .

- $x = \text{linprog}(f, A, b)$ は $\{Ax\}_i \leq b_i$ ($i = 1, 2$) の条件の下で, $f \cdot x$ の最小値を与える x を求める .

- この問題では

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 30 \\ 14 \end{pmatrix}, \quad f = \begin{pmatrix} -5 & -4 \end{pmatrix} \quad (7.8)$$

と選べばよい .

- $\text{Sol} = f \cdot x$ では, 上の問題の解である x を用いてこの値を計算する .

<pre>%Linear Programing Problem %Ax ≤ b (Constraint Conditions) %Optimization of f*x A=[4 2;1 3]; b=[30;14];f=[-5 -4]; x=linprog(f,A,b) % x is the point of the solution Sol=f*x % Answer</pre>	<pre>>> LinearProgramProb1 Optimal solution found. x = 6.2000 2.6000 Sol = -41.4000</pre>
--	--

図 7.3: 線形計画問題の例 .

7.3 非線形計画法

制約条件, 目的関数 (のすべて, あるいは一部) が一般に非線形である場合, たとえば次のようなものを非線形計画問題といいます .

7.3.1 非線形計画法の問題と解答

[問題]: $x \geq 0, y \geq 0$ において,
 制約条件 $1 \leq x^2 + y^2 \leq 2$ の下で,
 目的関数 $f(x, y) = x^2 + y$ を最大化せよ .

この問題を理解するために, 領域 $x \geq 0, y \geq 0$ で制約条件 $1 \leq x^2 + y^2 \leq 2$ (円環領域) を描き, その中で $f(x, y) = x^2 + y = c$ (放物線) を, 定数 c を変えながら描いてみましょう (図 7.4) .

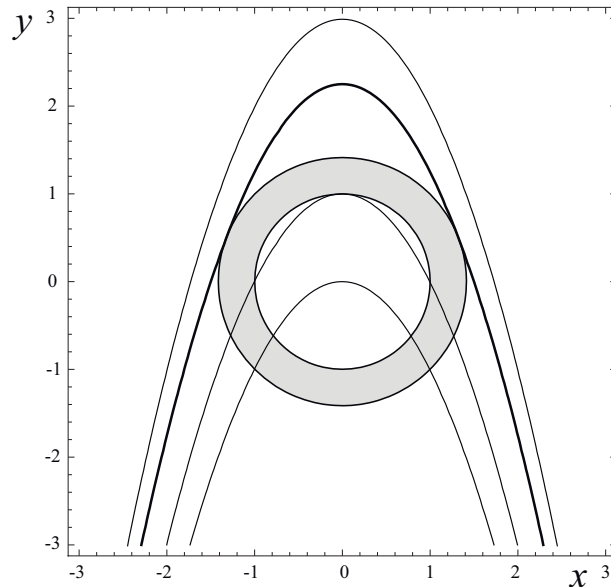


図 7.4: 非線形計画問題の例．グレー部分が制約条件で指定された領域で，目的関数の等高線 $f(x, y) = a$ は放物線である ($a = 3, 9/4, 1, 0$)．答は図から読み取れるように $x = \sqrt{7}/2, y = 1/2$ (太い放物線 ($a = 9/4$) と外円との接点) のときに $f(\sqrt{7}/2, 1/2) = 9/4$ である．

7.3.2 MATLAB の利用

<https://jp.mathworks.com/help/optim/ug/nonlinear-equality-and-inequality-constraints.html> をご覧ください．

- 手順 1. (右上) ファイル `objfun.m` を定義します．目的関数の定義です．問題では最大化ですから「最小化」に対応するため符号を反対にして定義しています． x と y が縦行列 x の第 1, 第 2 成分になります．
- 手順 2. (右上の下半分) ファイル `confun.m` を定義します．非線形制約条件の定義です． $x(1)^2 + x(2)^2 - 2, -x(1)^2 - x(2)^2 + 1, -x(1), -x(2)$ のどれもが負という条件です．
- 手順 3. (左) 制約付き最適化ルーチンを呼び出すメイン・パートです． x_0 は $x(1), x(2)$ の試行初期値です．

```

%Main Program NonLinearProgramProb2
x0 = [0.1,0.1]; % Make a starting guess at the solution
options = optimoptions(@fmincon,'Algorithm','sqp');
%options = optimoptions(SolverName,Name,Value) は、
%名前付きパラメーターSolverNameを指定値Valueにより変更し、optionsを返す。
[x,fval] = ...
fmincon(@objfun,x0,[],[],[],[],[],[],[],@confun,options);
%行末の3つ以上のピリオドは、現在のコマンドを次の行
%に続けるために使用。
x
fval
Sol=fval;

%Program objfun.m
% Step 1
function f = objfun(x)
f = -x(1)^2 -x(2);

%Program
%Step 2
function [c, ceq] = confun(x)
% Nonlinear inequality constraints
c = [x(1)^2+x(2)^2-2; -x(1)^2-x(2)^2+1; -x(1); -x(2)];
ceq = [];

>> NonLinearProgramProb2
<stopping criteria details>
x =
    1.3229    0.5000
fval =
   -2.2500

```

図 7.5: 非線形計画問題の例 .main プログラム(左), objfun.m と confun.m の定義(右上), 結果(右下)。

出力(右下) $x = 1.3229 (= \sqrt{7}/2)$, $y = 0.5000 (= 1/2)$ のとき, 最低値 $-2.2500 (= -9/4)$ を与えます。

第8章 統計

ここでは、MATLAB の Statistics and Machine Learning Toolbox を使用して、統計データの扱いを説明します。

8.1 データの入力と表示

8.1.1 データの形

まず最初に我々が思いつくのは、データが Excel 上に用意されている場合でしょう。

エクセルデータ Jap-Math-Sci.xlsx に図 8.1 のようなデータが用意されているとします。使用するはこの内の、第 3 列 number (个体番号)、第 4 列 sex (男女の別)、第 5 列 JapA (国語得点)、第 7 列 MathA (数学得点) です。¹

ここでは説明しませんが、カンマ付きデータ (csv ファイル) の場合には readmatrix(filename) を用います。

		number	sex	JapA	JapB	MathA	MathB	SciA	SciB	SciC
2015	3	1	2	27	7	33	9	16	6	10
2015	1	2	2	26	4	20	5	7	3	4
2015	1	3	2	27	7	29	12	19	6	13
2015	2	4	1	22	7	14	2	17	5	12
2015	1	5	2	27	8	31	8	16	6	10

図 8.1: 50 行の入力データの最初の数行。

¹このデータは文科省が公表した全国学力・学習状況調査 (全国学力テスト) のパブリックユースデータ (擬似データ) の一部にさらに手を加えた架空データである。

8.1.2 分布図および散布図

データの分布図あるいは散布図を上手に使いえば，データの中身の概要を把握することができます．

8.1.2.1 分布図

histogram コマンドを用いれば，データの分布をヒストグラムで表すことができます．

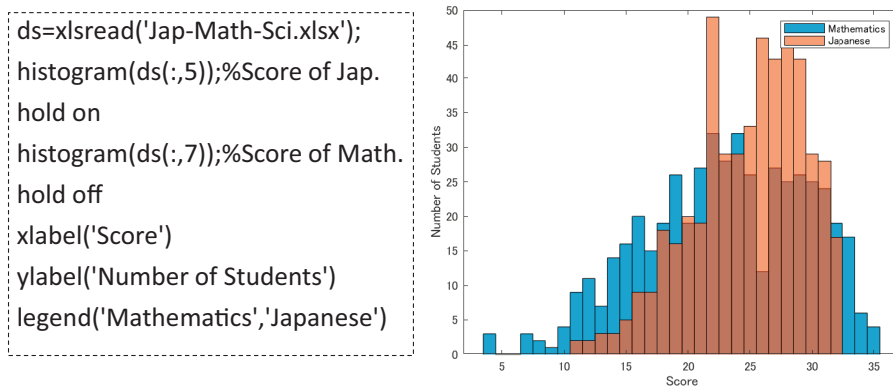


図 8.2: データ分布図．

- `ds=xlsread('filename')` では，Excel ファイル `filename` の数値データのみ，読み込みます．数値でないものも読みたいときには `[ds, headertext] = xlsread('filename')` とします．
- ここではヒストグラムを描くコマンド `histogram` を2回呼んで，データ `MathA` と `JapA` の分布を重ねることにより，分布の違いなどが分かります．
- `hold on` を挟まないと次の `histogram` 命令で前の図が消えてしまいます．

8.1.2.2 散布図

サンプルデータから，第1パラメタをx軸とし，第2パラメタをy軸とし散布図を描くコマンド

```
scatter(x,y)
```

が用意されています．また，サンプルの点の属性（group）を，色で区別して表すために

```
gscatter(x,y,group)
```

があります（図8.3）．

```
ds=xlsread('Jap-Math-Sci.xlsx');
gscatter(ds(:,3),ds(:,5),ds(:,4),...
        'br','!',20,'off','Number','Score')
hold on
gscatter(ds(:,3),ds(:,7),ds(:,4),'br','x',10,'off')
hold off
legend('Location','northeastoutside')
legend('Japanese 1','Japanese 2',...
        'Mathematics 1','Mathematics 2')
```

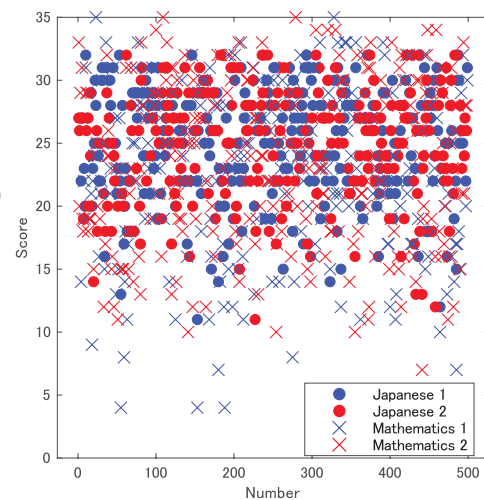


図 8.3: データ散布図．

ここでは男女の別を違う色で示したいので，gscatter を使いました．

- gscatter(x,y,group) は group 内のデータに従ってグループ分けされた (x,y) データの散布図を描きます．ここでは ds.sex の中の第4列のデータ 1, 2 (青、赤) に対応します．
- legend によってサンプルデータの説明が与えられます．
- 「...」は改行です．命令が横に長すぎるとき，これで改行・継続を示します．

```

ds=dataset('xlsfile', 'Jap-Math-Sci.xlsx');
mMathA=mean(ds.MathA)
sigMathA=std(ds.MathA)
mJapA=mean(ds.JapA)
sigJapA=std(ds.JapA)
cor=corrcoef(ds.MathA,ds.JapA)

```

```

>> Stat
mMathA =
    23.0100
sigMathA =
     6.4812
mJapA =
    24.8377
sigJapA =
     4.4945
cor =
    1.0000    0.6607
    0.6607    1.0000

```

図 8.4: 平均 mean，標準偏差 std および相関係数行列 corrcoef. 左：スクリプト，右：結果

8.2 平均，分散，相関

与えられたデータの平均値，標準偏差（分散の平方根）および相関係数の計算は簡単です（図 8.4）。ここで xlsread の代わりに使った dataset コマンドは，‘将来サポートされなくなる’ とアナウンスが出ていますので注意してください。

8.3 回帰直線

相関係数を見ると，例えばここで扱っている例では，MathA と JapA の間には 0.66 の相関があることを示しています。この相関は小さいのでしょうか，あるいは大きいのでしょうか。一般には，この数字はかなり強い相関があると認識されるでしょう。そのようなときには，MathA と JapA の値をそれぞれ x 軸， y 軸にとってデータの分布を見るとより良く分かり，役立ちます（図 8.5）。

- scatter で，横軸に MathA，縦軸に JapA の数値をとり，個々のデータの散布図を作る。
- lsline は回帰直線（最小二乗法による直線）を引くコマンド。

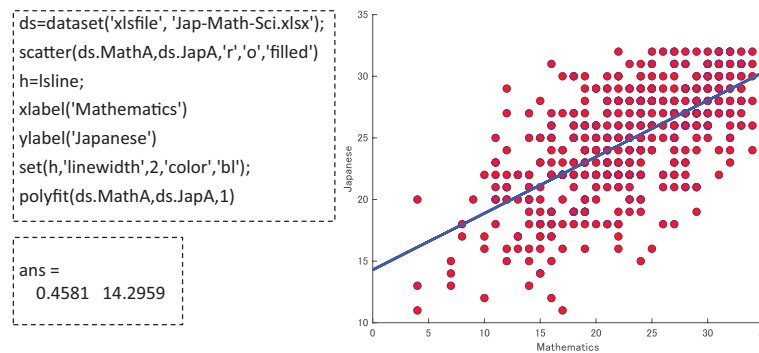


図 8.5: データの散布図と回帰直線 .

- `polyfit` で、データを多項式で最小二乗フィットした式を求める．ここでは $n = 1$ として直線の当てはめをし、 $\text{JapA} = 0.4581 * \text{MathA} + 14.2959$ を得た．
- 散布図からも、数学の成績の良い生徒は国語の成績も良い傾向が見られる．このことを定量的に表すのが上の直線の方程式である．さらには、数学の成績が 0 であっても、国語の成績は 0 ではないだろうことが見てとれる．

第9章 微分方程式

9.1 常微分方程式の解法

9.1.1 常微分方程式の初期条件と解

微分方程式

$$y'' + 4y' + 4y = 0$$

を初期条件

$$y(0) = 0.5, \quad y' = 4.0$$

の下で解いて，その振る舞いを図に示しましょう（図 9.1）。

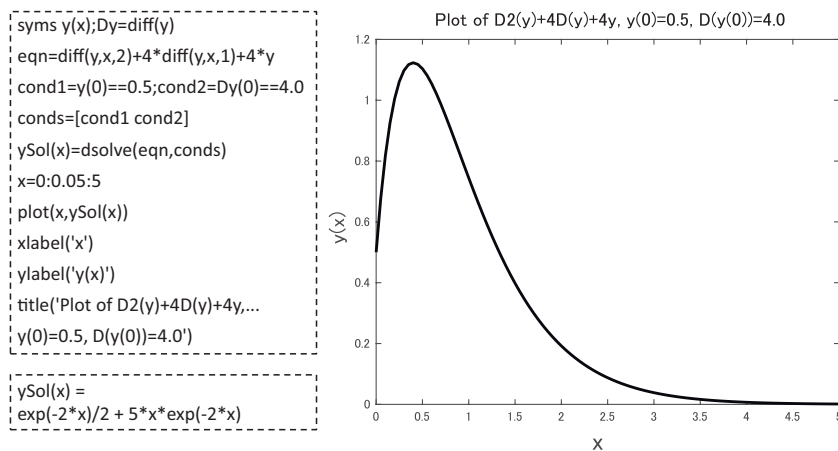


図 9.1: 常微分方程式 .

- `syms` で y, Dy を定義（シンボリック変数）。
- `eqn=...` で微分方程式を定義。

- 恒等式 cond1, cond2 を定義し, その二つを合わせて conds=... で条件式として定義.
- dsolve(eqn,conds) は, 「条件 conds の下で微分方程式 eqn=0 を解け」, というコマンド. 解として $ySol(x) = \exp(-2 * x)/2 + 5 * x * \exp(-2 * x)$ を返す ($y(x) = \frac{1}{2}e^{-2x} + 5xe^{-2x}$ が初期条件を満足する解である).
- x=0:0.05:5 は 0 から 5 まで 0.05 の刻み間隔で数ベクトル成分を定義.

9.1.2 常微分方程式の数値解法

同じ問題

$$y'' + 4y' + 4y = 0$$

を, 4 次の Runge - Kutta 法を基礎にした ODE45 ソルバーを用いて, 数値的に解きましょう. ODE は 1 階微分方程式の数値ソルバーです (図 9.2). ODE では微分方程式を *m ファイルで定義し, それをメインのスク립トで読み込みます.

```
[t,y] = ode45(@deq1,[0 5],[0.5, 4]);
plot(t,y(:,1),'-o',t,y(:,2),'-o')
xlabel('Time t');
ylabel('Solution y');
legend('y_1','y_2')
xlabel('x')
ylabel('y(x)')
title('Plot of D2(y)+4D(y)+4y,y(0)=0.5, D(y(0))=4.0')

function dydt = deq1(t,y)
%function of DiffEqSymbEx1p.m
dydt = [y(2); -4*y(2)-4*y(1)];
```

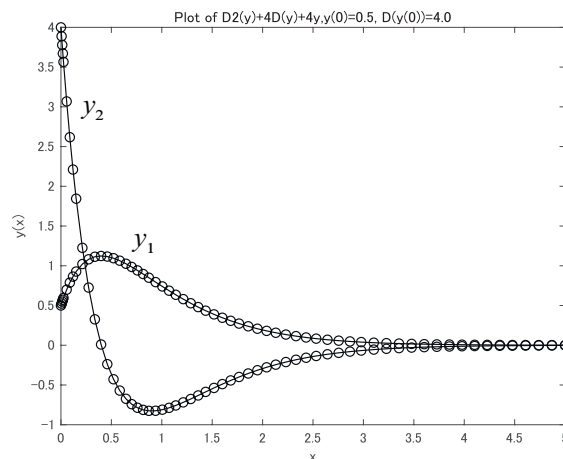


図 9.2: 常微分方程式の数値解法 (ode45 の利用). 左上: メインスク립ト. 左下: deq1.m ファイル.

まず，高階微分方程式を連立1階微分方程式に書き換えます：

$$\begin{aligned}y_1' &= y_2, \\y_2' &= -4y_2 - 4y_1.\end{aligned}$$

- ここでは微分方程式を定義するプログラムは `deq1.m` と名付けられている（図 9.2 左下）。
- ベクトル成分 $y(:, 1)$ が y ， $y(:, 2)$ が y' となる。
- 初期値は ODE45 のパラメータ `[0.5, 4]` で与える。

9.2 非正規型の微分方程式

9.2.1 非正規型の微分方程式の特異解

微分方程式 $y' = f(x, y)$ において， $f(x, y)$ が x, y の‘滑らかな1価関数’でないとき，これを非正規型と呼びます。非正規型の場合，解の一意性条件が壊れて，一般解に含まれない解（特異解）が現れることがあります。

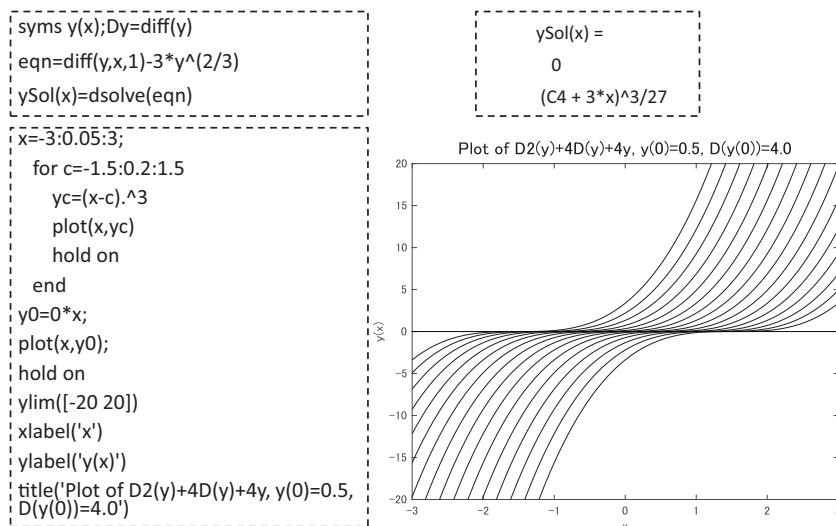


図 9.3: 非正規微分方程式。

微分方程式

$$y' = 3y^{2/3}$$

を解いてみましょう (図 9.3) . $y^{2/3}$ は y について多価です .

- 図右上が 2 種類の解 $ySol(x)$ を返したところ .
- 左下は図を描く部分 . 一般解 $y(x) = (x - c)^3$ を $c = -1.5$ から 1.5 までの範囲で 0.2 刻みで変化させた .
- 図でも分かるように , 一般解の包絡線がもう 1 つの解 $y = 0$. これを特異解という .

9.2.2 クレーローの方程式

非正規型微分方程式として有名なもの , クレーローの常微分方程式

$$y = y'x + \frac{1}{4}(y')^2$$

を解いてみましょう . 図 9.4 で , 右上が返ってきた解 . 解は 2 種類のもの

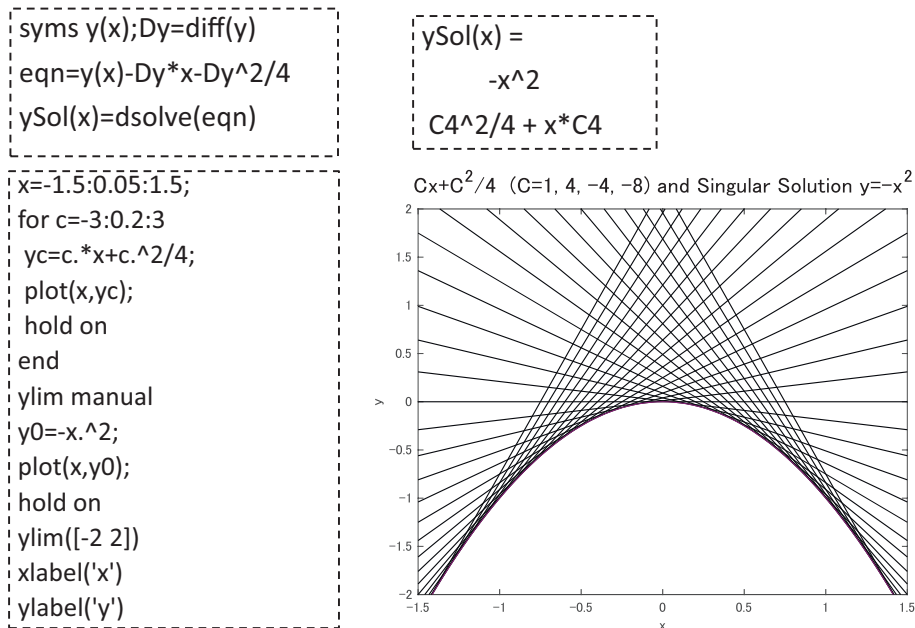


図 9.4: クレーローの方程式.

が与えられています . 左下は図を描く部分 . 一般解 $y(x) = cx + (1/4)c^2$ を $c = -3$ から 3 までの範囲で 0.2 刻みで変化させた直線群が示されています . この直線群の包絡線が $y = -x^2$ であり , 特異解です .

第10章 フーリエ級数展開

10.1 フーリエ級数

複雑な変化をする量は、単純な成分に分けて考えるのが鉄則です。信号解析その他で広く用いられるフーリエ級数展開を考えることにしましょう。

10.1.1 フーリエの方法

$[-a, a]$ を周期とする関数 $f(x)$ を三角関数の級数

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{n\pi x}{a} + b_n \sin \frac{n\pi x}{a} \right)$$

と表すとき、これを「フーリエ級数展開」といい、展開係数 a_n, b_n は次の様に計算できます。

$$a_n = \frac{1}{a} \int_{-a}^a f(x) \cos \frac{n\pi x}{a} dx, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$b_n = \frac{1}{a} \int_{-a}^a f(x) \sin \frac{n\pi x}{a} dx, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

10.1.2 簡単な例題

次の関数を考えましょう。

$$f(x) = \begin{cases} -1 & : -\pi < x \leq 0 \\ 1 & : 0 < x < \pi \end{cases}$$

この関数は、 x の奇関数ですから \sin 成分だけが現れます：

$$a_n = \frac{1}{\pi} \left[\int_0^{\pi} \cos nxdx - \int_{-\pi}^0 \cos nxdx \right] = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$b_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} \sin nxdx = \frac{2}{\pi} \frac{1 - (-1)^n}{n}, \quad n = 1, 2, \dots$$

したがって上の関数のフーリエ級数展開は

$$f(x) \sim S(x) = \frac{4}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\sin(2n+1)x}{2n+1}$$

となります。

ここで、右辺で $x=0$ とすると 0 となりますが、一方で $f(0) = -1$ ですから等号は成り立ちません：

$$S(0) = \frac{1}{2}\{f(0_+) + f(0_-)\} \neq f(0).$$

このことがあるので $f(x) = S(x) = \dots$ とは書かず、 $f(x) \sim S(x) = \dots$ と書きました。

一般にフーリエ級数 $S(x)$ は、 $x=c$ が $f(x)$ の連続点であるなら正しく $f(c)$ を与え、また c が不連続なら左右から c に近づいた値の平均値

$$S(c) = \frac{1}{2}\{f(c+0) + f(c-0)\}$$

を与えることが知られています。これをディリクレ (Dirichlet) の定理といいます。

10.1.3 MATLAB の適用

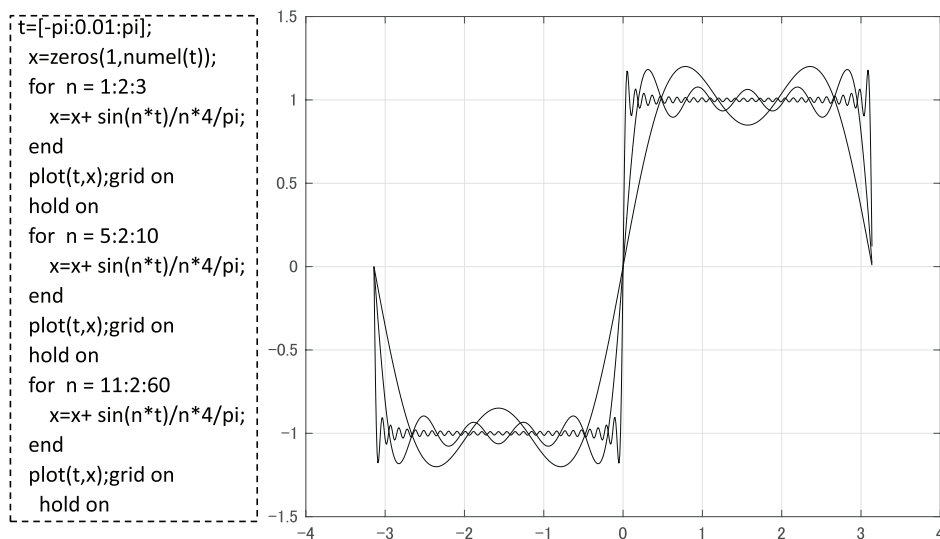


図 10.1: 部分和 $S_N(x) = \frac{4}{\pi} \sum_{n=1}^N \frac{\sin(2n+1)x}{2n+1}$ を N を変えて示す。

図 10.1 に部分和

$$S_N(x) = \frac{4}{\pi} \sum_{n=1}^N \frac{\sin(2n+1)x}{2n+1}$$

示します。

$x = 0$ および $\pm\pi$ 近傍での振る舞いに注意してください。これについては詳しい説明に踏み込みませんが。