

## 課題

データサイエンス基礎コース1の内容を踏まえて下記の項目に解答せよ。(適宜, 参考書等を活用すること)

下記の数式について述べよ.

$$u(t) = \bar{u}e^{i\lambda t}$$

1.  $\lambda = \lambda_r + i\lambda_i$ を代入して展開せよ.
2.  $\lambda_i$ が正及び負の場合 $u(t)$ が, どのような挙動を示すか述べよ.
3. 対数を取り展開せよ.

## 本課題の狙い

ここでは, 初等関数(三角関数, 指数関数, 対数関数)がどのような形で現代の科学記述で活用されているかについて考慮している. 具体的には, 流体力学や固体力学の時間発展を解析する際に用いられる線形安定性解析の基本的な性質について課題を出している. このような初等関数であっても非常に重要なツールとなり得る.

## 留意点

より詳細な, 課題については「基礎コース(2)導関数とテイラー展開」で出題することとする. また, 説明はないが複素数については既知としている.

## 解答例

下記の数式について述べよ.

$$u(t) = \bar{u}e^{i\lambda t}$$

1.  $\lambda = \lambda_r + i\lambda_i$ を代入して展開せよ.

$$\bar{u}e^{-\lambda_i t}\{\cos(\lambda_r t) + i \sin(\lambda_r t)\}$$

2.  $\lambda_i$ が正及び負の場合 $u(t)$ が, どのような挙動を示すか述べよ.

$\lambda_i$ が正の場合:  $\lambda_r$ で周期的に振動しながら $u(t)$ は, 減衰する.

$\lambda_i$ が負の場合:  $\lambda_r$ で周期的に振動しながら $u(t)$ は, 増幅する.

3. 対数を取り展開せよ.

$$\log(u) = -\lambda_i t + \log\{\cos(\lambda_r t) + i \sin(\lambda_r t)\}$$

## 課題

データサイエンス基礎コース 2 の内容を踏まえて下記の項目に解答せよ。（適宜，参考書等を活用すること）

1.  $e^x, \cos(x), \sin(x)$  をマクローリン展開せよ。
2. 1 の結果を用いて，オイラーの公式： $e^{ix} = \cos(x) + i \sin(x)$  を導出せよ。また， $\lambda = \lambda_r + i\lambda_i$  として  $e^{i\lambda t}$  を導出せよ。
3.  $u(t) = \bar{u}e^{i\lambda t}$  とし 2 の結果を用いて， $u(t)$  を書き換えよ。
4.  $\frac{\partial u}{\partial t} = -\alpha u$  における  $\alpha$  を求めよ。

## 本課題の狙い

ここで、「基礎コース(1)初等関数の性質」で出題した課題の指数関数に関して，オイラーの公式を用いて詳細な性質を考慮している。それによって， $u(t)$  の時間変化，特に増幅・減衰だけでなく周期関数の周波数までもが解析の対象となる。更に設問 4 のように非常にシンプルな方程式であれば，増幅・減衰を表す  $\lambda_i$  が  $\alpha$  として現れることに注意すること。

## 留意点

具体的な課題では，複数の方程式が連立したシステムにおいて同様の操作を行うため，場合によっては大規模な行列の固有値問題を解く必要がある。また，扱うシステム（固有値行列）毎に，数値計算スキームを選択する必要があるため，実際の課題に取り組む際には「行列の性質」について十分に考慮した上で，適切な数値計算スキームを選択することになる。

## 解答例

1.  $e^x, \cos(x), \sin(x)$  をマクローリン展開せよ.

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}, \cos(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} x^{2n}, \sin(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} x^{(2n+1)}$$

2. 1 の結果を用いて、オイラーの公式:  $e^{ix} = \cos(x) + i \sin(x)$  を導出せよ. また,  $\lambda = \lambda_r + i\lambda_i$  として  $e^{i\lambda t}$  を導出せよ.

$$\begin{aligned} e^{ix} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} x^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^{2n}}{(2n)!} x^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^{2n+1}}{(2n+1)!} x^{2n+1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} x^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} x^{(2n+1)} \\ &= \cos(x) + i \sin(x) \end{aligned}$$

$$e^{i\lambda t} = e^{i\lambda_i t + i\lambda_r t} = e^{-\lambda_i t + i\lambda_r t} = e^{-\lambda_i t} \{\cos(\lambda_r t) + i \sin(\lambda_r t)\}$$

3.  $u(t) = \bar{u}e^{i\lambda t}$  とし 2 の結果を用いて,  $u(t)$  を書き換えよ.

$$u(t) = \bar{u}e^{-\lambda_i t} \{\cos(\lambda_r t) + i \sin(\lambda_r t)\}$$

4.  $\frac{\partial u}{\partial t} = -\alpha u$  における  $\alpha$  を求めよ.

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= i\lambda \bar{u}e^{i\lambda t}, -\alpha u = -\alpha \bar{u}e^{i\lambda t} \\ \rightarrow i\lambda &= i(\lambda_r + i\lambda_i) = -\lambda_i + i\lambda_r = -\alpha \end{aligned}$$

## 課題

データサイエンス基礎コース3の内容を踏まえて下記の項目に解答せよ。(適宜, 参考書等を活用すること)

1. 時間 $t$ , 空間 $x$ として $f(t, x)$ をテーラー展開せよ. ここで,  $u = \frac{\delta x}{\delta t}$ とする.

$$f(t + \delta t, x + \delta x) = f(t, x) + \dots$$

2. 1の結果を利用して,  $f(t, x)$ の物質微分を取れ.
3. 合成関数 $L(g(x)) = \frac{1}{2}g^2(x)$ において $L(g(x + \delta x))$ を導出せよ.
4. 合成関数 $L(g(x))$ の微分を取れ.

## 本課題の狙い

ここでは主に, 物質微分と合成関数の微分について考察を行っている. 物質微分は偏微分方程式(例えば, 移流拡散法方程式, euler方程式, Navier-Stokes方程式等)を記述する上で極めて重要な概念である一方, 導出が非常に容易である. また, 合成関数の微分は最適化問題を解く際に基本的な技術となるため, 「基礎コース(4)関数の極値, 最適化と数理計画への応用」の前に扱うことにした.

## 留意点

本来であれば, ベクトル記号を用いて, 3次元空間における物質微分の式を導出することが望ましいが, 本コースでは「基礎コース(9)ベクトルと行列」まで待たなくてはいけない. そこで, 受講者には, ベクトルを学習した後に再度, 本課題に取り組みベクトルで物質微分の表記を試みてほしい.

## 解答例

1. 時間 $t$ , 空間 $x$ として $f(t, x)$ をテーラー展開せよ. ここで,  $u = \frac{\delta x}{\delta t}$ とする.

$$f(t + \delta t, x + \delta x) = f(t, x) + \delta t \left( \frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} \right)$$

2. 1の結果を利用して,  $f(t, x)$ の物質微分を取れ.

$$\lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{f(t + \delta t, x + \delta x) - f(t, x)}{\delta t} = \frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x}$$

3. 合成関数 $L(g(x)) = \frac{1}{2}g^2(x)$ において $L(g(x + \delta x))$ を導出せよ.

$$\begin{aligned} L(g(x + \delta x)) &= \frac{1}{2} \{g(x + \delta x)\}^2 \\ &= \frac{1}{2} \left\{ g(t, x) + \delta t \frac{\partial g}{\partial x} \right\}^2 \\ &= \frac{1}{2} g^2(x) + \delta t g(x) \frac{\partial g}{\partial x} + \delta t^2 \left( \frac{\partial g}{\partial x} \right)^2 \\ &= L(g(x)) + \delta t g(x) \frac{\partial g}{\partial x} + \delta t^2 \left( \frac{\partial g}{\partial x} \right)^2 \end{aligned}$$

4.  $L(g(x))$ の微分を取れ.

$$\lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{L(g(x + \delta x)) - L(g(x))}{\delta x} = g(x) \frac{\partial g}{\partial x}$$

## 課題

データサイエンス基礎コース 4 の内容を踏まえて下記の項目に解答せよ。（適宜，参考書等を活用すること）

1.  $L(x, y, \lambda) = 2x + 3y + \lambda(x^2 + y^2 - 1)$  に対して， $\frac{\partial L}{\partial x}$ ,  $\frac{\partial L}{\partial y}$ ,  $\frac{\partial L}{\partial \lambda}$  を求めよ.
2. 1 の結果を受けて， $\frac{\partial L}{\partial x} = 0$ ,  $\frac{\partial L}{\partial y} = 0$ ,  $\frac{\partial L}{\partial \lambda} = 0$  として  $x, y$  を求めよ.
3. 更に， $x^2 + y^2 - 1 = 0$  を満足することを検証せよ.

## 本課題の狙い

設問 1,2 では，最適化問題の基本的な技術である Lagrange の未定乗数法を扱っている。Lagrange の未定乗数法では，目的関数  $(2x + 3y)$  と Lagrange 乗数を掛けた制約関数  $(x^2 + y^2 - 1)$  の和を最小化するというものである。

## 留意点

工学的に最適化問題のフレームワークは，設問 1,2 のような代数方程式で与えられることはなく，エネルギー等が目的関数として，偏微分方程式が制約関数として定義されることが多い。しかしながら，設問 1.2 のようにシンプルな問題でアルゴリズムを理解することは有用である。

## 解答例

4.  $L(x, y, \lambda) = 2x + 3y + \lambda(x^2 + y^2 - 1)$  に対して,  $\frac{\partial L}{\partial x}, \frac{\partial L}{\partial y}, \frac{\partial L}{\partial \lambda}$  を求めよ.

$$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial x} &= 2 + 2x\lambda, \\ \frac{\partial L}{\partial y} &= 3 + 2y\lambda, \\ \frac{\partial L}{\partial \lambda} &= x^2 + y^2 - 1\end{aligned}$$

5. 1 の結果を受けて,  $\frac{\partial L}{\partial x} = 0, \frac{\partial L}{\partial y} = 0, \frac{\partial L}{\partial \lambda} = 0$  として  $x, y$  を求めよ.

$$(x, y) = \left( \pm \frac{2}{\sqrt{13}}, \pm \frac{3}{\sqrt{13}} \right)$$

6. 更に,  $x^2 + y^2 - 1 = 0$  を満足することを検証せよ.

省略



## 課題

データサイエンス基礎コース 5 の内容を踏まえて下記の項目に解答せよ。（適宜，参考書等を活用すること）

1.  $u_i(t) = \sin(\alpha_i t) + \cos(\alpha_i t)$  として， $\sum_{i,j=1}^2 u_i(t)u_j(t)$  を記述せよ。
2.  $\sum_{i,j=1}^2 \overline{[u_i(t)u_j(t)]}$  を導出せよ。ここで， $(\cdot)$  は時間積分を表す。

## 本課題の狙い

直行性は一般的に固有値問題を解くことで得られ，現代の科学分野では極めて重要な概念である。本課題では，初等関数の一つである三角関数の直行性という性質を利用して課題を出している。仮に，この直行性という性質を利用しない場合， $\sum_{i,j=1}^2 \overline{[u_i(t)u_j(t)]}$  は煩雑な数式となり扱いが困難となるが，三角関数の直行性のお陰で極めてシンプルな数式となることがわかる。

## 留意点

積分は面積や体積を求めるための道具であるが，今回のように直行性を利用すると内積という概念を導入することになり，更なる広がりをもたらされるが，これにはベクトル解析や積分等の知識が必要であるため多くを触れないことにする。

## 解答例

3.  $u_i(t) = \sin(\alpha_i t) + \cos(\alpha_i t)$ として、 $\sum_{i,j=1}^2 u_i(t)u_j(t)$ を記述せよ.

$$\begin{aligned} & \sum_{i,j=1}^2 u_i(t)u_j(t) \\ &= \{u_1(t)\}^2 + 2u_1(t)u_2(t) + \{u_2(t)\}^2 \\ &= \sin^2(\alpha_1 t) + \cos^2(\alpha_1 t) + 2\sin(\alpha_1 t)\cos(\alpha_1 t) + \sin^2(\alpha_2 t) + \cos^2(\alpha_2 t) + 2\sin(\alpha_2 t)\cos(\alpha_2 t) \end{aligned}$$

4.  $\sum_{i,j=1}^2 \overline{[u_i(t)u_j(t)]}$ を導出せよ. ここで、 $(\bar{\cdot})$ は時間積分を表す.

$$\sum_{i,j=1}^2 \overline{[u_i(t)u_j(t)]} = \overline{[\sin^2(\alpha_1 t) + \cos^2(\alpha_1 t) + \sin^2(\alpha_2 t) + \cos^2(\alpha_2 t)]}$$

次に、 $\tau_i = \alpha_i t$ とすると、

$$\int_0^{\frac{\pi}{2\alpha_1}} \sin^2(\alpha_1 t) dt = \frac{1}{\alpha_1} \int_0^{\frac{1}{2}\pi} \sin^2(\tau_1) d\tau_1 = \frac{1}{\alpha_1} \frac{\pi}{2} \frac{(n-1)!}{n!!}$$

であるから、 $\sum_{i,j=1}^2 \overline{[u_i(t)u_j(t)]} = \left(\frac{1}{\alpha_1} + \frac{1}{\alpha_2}\right) \pi \frac{(n-1)!}{n!!}$ となる.

## 課題

データサイエンス基礎コース 6 の内容を踏まえて下記の項目に解答せよ。（適宜，参考書等を活用すること）

1.  $\frac{\partial f(x)g(x)}{\partial x}$  を展開せよ.
2. 1 で得られた結果に対して，両辺を区間  $[a, b]$  で積分し部分積分の公式を導出せよ.
3.  $f(x) = \frac{\partial h}{\partial x}$  として， $\frac{\partial f(x)g(x)}{\partial x}$  に対して部分積分の公式を適用せよ.
4. 1-3 の結果を用いて， $\int_a^b \left\{ \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} - 1 \right\} g \, dx$  を導出せよ.

## 本課題の狙い

有限要素法は，工学分野や産業界において必要不可欠な数値計算技術である．有限要素法では強形式を弱形式に変換することが求められ，その際に部分積分が活用される．本課題では，1 次元 Poisson 方程式を強形式から弱形式に変換する点に着目して課題を設定している．

## 留意点

ここでは多くを触れることはしないが，Poisson 方程式を弱形式に変換することで，解が一意的に存在することを証明することが可能である．Poisson 方程式が多くの自然科学に現れる偏微分方程式の基礎をなしていることから，このような知見は極めて重要なマイルストーンである．

## 解答例

1.  $\frac{\partial f(x)g(x)}{\partial x}$ を展開せよ.

$$\frac{\partial f(x)g(x)}{\partial x} = \frac{\partial f(x)}{\partial x}g(x) + f(x)\frac{\partial g(x)}{\partial x}$$

2. 1で得られた結果に対して、両辺を区間 $[a, b]$ で積分し部分積分の公式を導出せよ.

$$\begin{aligned}\int_a^b \frac{\partial f(x)g(x)}{\partial x} dx &= \int_a^b \frac{\partial f(x)}{\partial x}g(x) dx + \int_a^b f(x)\frac{\partial g(x)}{\partial x} dx, \\ \rightarrow \int_a^b \frac{\partial f(x)}{\partial x}g(x) dx &= \int_a^b \frac{\partial f(x)g(x)}{\partial x} dx - \int_a^b f(x)\frac{\partial g(x)}{\partial x} dx, \\ \rightarrow \int_a^b \frac{\partial f(x)}{\partial x}g(x) dx &= [f(x)g(x)]_a^b - \int_a^b f(x)\frac{\partial g(x)}{\partial x} dx\end{aligned}$$

3.  $f = \frac{\partial h}{\partial x}$ として、 $\frac{\partial f g}{\partial x}$ に対して部分積分の公式を適用せよ.

$$\int_a^b \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} g dx = \left[ \frac{\partial h}{\partial x} g \right]_a^b - \int_a^b \frac{\partial h}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial x} dx$$

4. 1-3の結果を用いて、 $\int_a^b \left\{ \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} - 1 \right\} g dx$ を導出せよ.

$$\int_a^b \left\{ \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} - 1 \right\} g dx = \left[ \frac{\partial h}{\partial x} g \right]_a^b - \int_a^b \frac{\partial h}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial x} dx - \int_a^b g dx$$

## 課題

データサイエンス基礎コース 7 の内容を踏まえて下記の項目に解答せよ。（適宜，参考書等を活用すること）

1.  $\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} - 1 = 0$  の両辺に  $g$  を掛けて， $x, y$  方向に対して積分せよ。
2. 1 で得られた結果に対して，部分積分を行え。
3. 1-2 で行った操作を  $\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} - 1 = 0$  に対して行え。

## 本課題の狙い

有限要素法は，工学分野や産業界において必要不可欠な数値計算技術である．有限要素法では強形式を弱形式に変換することが求められ，その際に部分積分が活用される．本課題では，2,3 次元 Poisson 方程式を強形式から弱形式に変換する点に着目して課題を設定している．基本的な操作は 1 次元 Poisson 方程式と同一である．

## 留意点

実際に有限要素法を用いて計算する際には，ガウスの発散定理を用いて境界積分を導出し，その上で境界条件を弱形式に加えることが求められる．しかし，ベクトル解析の知識が必要なので本課題では触れないことにする．

## 解答例

1.  $\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} - 1 = 0$ の両辺に $g$ を掛けて、 $x, y$ 方向に対して積分せよ.

$$\int_x \left[ \int_y \left\{ \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} - 1 \right\} g dx \right] dy = \int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} - 1 \right\} g d\Omega$$

2. 1で得られた結果に対して、部分積分を行え.

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} - 1 \right\} g d\Omega &= \int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} g + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} g - g \right\} d\Omega \\ &= \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial h}{\partial x} g \right) d\Omega + \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial h}{\partial y} g \right) d\Omega - \int_{\Omega} \frac{\partial h}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial x} d\Omega - \int_{\Omega} \frac{\partial h}{\partial y} \frac{\partial g}{\partial y} d\Omega + \int_{\Omega} g d\Omega \end{aligned}$$

3. 1-2で行った操作を $\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} - 1 = 0$ に対して行え.

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial h}{\partial x} g \right) d\Omega + \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial h}{\partial y} g \right) d\Omega + \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\partial h}{\partial z} g \right) d\Omega \\ &- \int_{\Omega} \frac{\partial h}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial x} d\Omega - \int_{\Omega} \frac{\partial h}{\partial y} \frac{\partial g}{\partial y} d\Omega - \int_{\Omega} \frac{\partial h}{\partial z} \frac{\partial g}{\partial z} d\Omega \\ &+ \int_{\Omega} g d\Omega \end{aligned}$$

## 課題

データサイエンス基礎コース 8 の内容を踏まえて下記の項目に解答せよ。（適宜，参考書等を活用すること）

1. ベクトル  $\mathbf{a} = [a_1, a_2, a_3]^T$ ,  $\mathbf{b} = [b_1, b_2, b_3]^T$  の長さを記述せよ.
2. ベクトル  $\mathbf{a}, \mathbf{b}$  がなす角を  $\theta$  として  $|\mathbf{a}||\mathbf{b}| \sin \theta$  が平行四辺形の面積となっていることを確認せよ.
3.  $\sin \theta = \sqrt{1 - \cos^2 \theta}$  と  $\mathbf{a}^T \mathbf{b} = |\mathbf{a}||\mathbf{b}| \cos \theta$  を利用して，  $|\mathbf{a}||\mathbf{b}| \sin \theta$  を展開せよ.

## 本課題の狙い

本課題では，平行四辺形の面積を求めることに重点を置いた設問を出している．特に触れてはいないが，設問 3 はベクトル  $\mathbf{a}, \mathbf{b}$  の外積によって求めることが可能であるので実際に計算してみることが推奨する．また，この外積によって与えられた量をモーメントと呼ぶ．

## 留意点

今回の課題では内積や外積といったベクトル量と平行四辺形の面積といった幾何学的な情報が一致している好例といえる．そのため，実際に自身で図を書きながら，これらの理解を深めることを推奨する．

## 解答例

1. ベクトル  $\mathbf{a} = [a_1, a_2, a_3]^T$ ,  $\mathbf{b} = [b_1, b_2, b_3]^T$  の長さを記述せよ.

$$|\mathbf{a}| = \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + a_3^2}, |\mathbf{b}| = \sqrt{b_1^2 + b_2^2 + b_3^2}$$

2. ベクトル  $\mathbf{a}, \mathbf{b}$  がなす角を  $\theta$  として  $|\mathbf{a}||\mathbf{b}| \sin \theta$  が平行四辺形の面積となっていることを確認せよ.

省略

3.  $\sin \theta = \sqrt{1 - \cos^2 \theta}$  と  $\mathbf{a}^T \mathbf{b} = |\mathbf{a}||\mathbf{b}| \cos \theta$  を利用して,  $|\mathbf{a}||\mathbf{b}| \sin \theta$  を展開せよ.

$$\begin{aligned} & |\mathbf{a}||\mathbf{b}| \sin \theta \\ &= |\mathbf{a}||\mathbf{b}| \sqrt{1 - \left( \frac{\mathbf{a}^T \mathbf{b}}{|\mathbf{a}||\mathbf{b}|} \right)^2} \\ &= \sqrt{|\mathbf{a}|^2 |\mathbf{b}|^2 - (\mathbf{a}^T \mathbf{b})^2} \\ &= \sqrt{(a_2 b_3 - b_2 a_3)^2 + (a_1 b_3 - a_3 b_1)^2 + (a_1 b_2 - a_2 b_1)^2} \end{aligned}$$



## 課題

データサイエンス基礎コース 9 の内容を踏まえて下記の項目に解答せよ。（適宜，参考書等を活用すること）

1. ベクトル  $\mathbf{a} = [a_1, a_2]^T, \mathbf{b} = [b_1, b_2]^T$  に関して  $\mathbf{a}^T \mathbf{b}$  と  $\mathbf{a} \mathbf{b}^T$  を計算せよ.
2. 内積  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$  を計算し，  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{a}^T \mathbf{b}$  であることを確認せよ.
3.  $\nabla = \left[ \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right]$  と  $\mathbf{M} = \mathbf{a} \mathbf{b}^T$  を用いて  $\mathbf{M}(\nabla f)^T$  を展開せよ.
4.  $\nabla \cdot \left[ \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right]^T$  を用いて  $\nabla \cdot \{\mathbf{M}(\nabla f)^T\}$  を展開せよ.

## 本課題の狙い

「基礎コース(7)重責分」の課題では Poisson 方程式について扱ったが，ここでは一般的に自然科学で扱われる  $\nabla \cdot \{\mathbf{M}(\nabla f)^T\}$  について考察を行っている。

## 留意点

流体科学や材料科学では  $f$  がベクトルとして扱われる。意欲のある受講者は設問 4 で  $f$  がベクトルの場合を考慮して式変形を行うことを推奨する。

## 解答例

1. ベクトル  $\mathbf{a} = [a_1, a_2]^T, \mathbf{b} = [b_1, b_2]^T$  に関して  $\mathbf{a}^T \mathbf{b}$  と  $\mathbf{a} \mathbf{b}^T$  を計算せよ.

$$\mathbf{a}^T \mathbf{b} = a_1 b_1 + a_2 b_2, \mathbf{a} \mathbf{b}^T = \begin{bmatrix} a_1 b_1 & a_1 b_2 \\ a_2 b_1 & a_2 b_2 \end{bmatrix}$$

2. 内積  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$  を計算し,  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{a}^T \mathbf{b}$  であることを確認せよ.

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_1 b_1 + a_2 b_2 = \mathbf{a}^T \mathbf{b}$$

3.  $\nabla = \left[ \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right]$  と  $\mathbf{M} = \mathbf{a} \mathbf{b}^T$  を用いて  $\mathbf{M}(\nabla f)^T$  を展開せよ.

$$\mathbf{M}(\nabla f)^T = \begin{bmatrix} a_1 b_1 & a_1 b_2 \\ a_2 b_1 & a_2 b_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} \\ \frac{\partial f}{\partial y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 b_1 \frac{\partial f}{\partial x} + a_1 b_2 \frac{\partial f}{\partial y} \\ a_2 b_1 \frac{\partial f}{\partial x} + a_2 b_2 \frac{\partial f}{\partial y} \end{bmatrix}$$

4.  $\nabla \cdot = \left[ \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right]^T$  を用いて  $\nabla \cdot \{\mathbf{M}(\nabla f)^T\}$  を展開せよ.

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \{\mathbf{M}(\nabla f)^T\} &= \nabla \cdot \begin{bmatrix} a_1 b_1 \frac{\partial f}{\partial x} + a_1 b_2 \frac{\partial f}{\partial y} \\ a_2 b_1 \frac{\partial f}{\partial x} + a_2 b_2 \frac{\partial f}{\partial y} \end{bmatrix} \\ &= \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( a_1 b_1 \frac{\partial f}{\partial x} + a_1 b_2 \frac{\partial f}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( a_2 b_1 \frac{\partial f}{\partial x} + a_2 b_2 \frac{\partial f}{\partial y} \right) \right] \\ &= \left[ a_1 b_1 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + a_1 b_2 \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + a_2 b_1 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + a_2 b_2 \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \right] \end{aligned}$$

## 課題

データサイエンス基礎コース 10 の内容を踏まえて下記の項目に解答せよ。（適宜、参考書等を活用すること）

1. 回転行列を用いてベクトル  $\mathbf{u} = [x, y]^T$  を  $\theta$  だけ回転させた際の位置座標ベクトル  $U = [X, Y]^T$  を求めよ。
2. 回転行列の行列式を計算せよ。なお行列式とは行列  $A$  に対して下記の演算を行う事である。

$$A = \begin{bmatrix} a & c \\ b & d \end{bmatrix}, \det \begin{vmatrix} a & c \\ b & d \end{vmatrix} = ad - bc,$$

3.  $\theta = \frac{1}{2}\pi$ ,  $x = 5, y = 3$  の場合,  $[X, Y]^T$  を求めよ。

## 本課題の狙い

ここでは代表的な線形写像として回転行列を扱っており、位置座標ベクトル  $[x, y]^T$  が原点を中心に  $\theta$  だけ回転した  $[X, Y]^T$  を求める問題となっている。また、より一般的には任意の  $n$  次元空間  $\Omega$  における位置座標ベクトル  $x \in \mathbb{R}^n$  に対して線形写像  $A$  を課すことで領域が変形した後の位置座標ベクトル  $A(x)$  が与えられる。

## 留意点

初歩的な力学の教科書の前半部分で微小領域に剪断応力と垂直応力を与えた場合の変形を扱う説明があるが、本課題の設問と同様の操作を行う。このように、工学的には線形写像は極めて基本的な技術であるし、画像処理等でも古くから扱われている。

## 解答例

1. 回転行列を用いてベクトル  $\mathbf{u} = [x, y]^T$  を  $\theta$  だけ回転させた際の位置座標ベクトル  $U = [X, Y]^T$  を求めよ.

$$\begin{bmatrix} X \\ Y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \cos \theta - y \sin \theta \\ x \sin \theta + y \cos \theta \end{bmatrix}$$

2. 回転行列の行列式を計算せよ. なお行列式とは行列  $A$  に対して下記の演算を行う事である.

$$A = \begin{bmatrix} a & c \\ b & d \end{bmatrix}, \det \begin{vmatrix} a & c \\ b & d \end{vmatrix} = ad - bc,$$

$$\det \begin{vmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{vmatrix} = \cos^2 \theta + \sin^2 \theta = 1$$

3.  $\theta = \frac{1}{2}\pi$ ,  $x = 5, y = 3$  の場合,  $[X, Y]^T$  を求めよ.

$$\begin{bmatrix} \cos \frac{1}{2}\pi & -\sin \frac{1}{2}\pi \\ \sin \frac{1}{2}\pi & \cos \frac{1}{2}\pi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 \\ 3 \end{bmatrix} = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 \\ 3 \end{bmatrix} = \sqrt{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \end{bmatrix}$$

## 課題

一般化逆行列について、以下の問いに答えよ。

1. 行列

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

に対して、その一般化逆行列を1つ求めよ。

2. 行列 A の擬似逆行列(Moore Penrose 一般逆行列)を求めよ。

3. 以下の連立方程式の解を1つ求めよ。

$$y = Ax, \quad A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad y = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

## 本課題の狙い

多変量データの解析では、様々な過程で連立方程式に帰着させて問題を解くことがある。連立方程式をベクトル・行列計算とみなして、一般化逆行列、擬似逆行列を用いて方程式を解くことができる。方程式をこのような見方で分析・理論展開できることを理解する。

## 解答例

1.

$X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} \\ x_{21} & x_{22} \\ x_{31} & x_{32} \end{pmatrix}$  を  $AXA = A$  に代入すると

$$\begin{pmatrix} x_{11} - x_{31} & x_{12} - x_{32} & -x_{11} + x_{31} \\ x_{21} & x_{22} & -x_{21} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

これを満足する  $X$  の一例として,

$$X = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

が一般化逆行列となる.

2. 上述と同様に擬似逆行列の4つの定義式より、擬似逆行列  $A^+$  は以下となる。

$$A^+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -2 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

となる。

ちなみに、行列  $A$  がフルランクなので、 $A^+ = A^T (A A^T)^{-1}$  として計算することもできる。

$$A A^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$(A A^T)^{-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$A^+ = A^T (A A^T)^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

3. 解の1つは、 $\mathbf{x} = A^+\mathbf{y}$  として求められるので、

$$\mathbf{x} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

### 留意点

連立方程式の解が存在しない場合でも、できる限り方程式を満足する近似解を求める場合でも、擬似逆行列が使えることを覚えておくこと。

## 課題

行列の対称性、べき等性 ( $X^2 = X$ が成り立つなら $X$ はべき等行列) について、以下の問いに答えよ。

1. 行列  $A$  とその擬似逆行列  $A^+$  に関して、行列  $AA^+$  は対称かつべき等行列であることを示せ。
2. 行列  $A$  とその擬似逆行列  $A^+$  に関して、行列  $A^+A$  は対称かつべき等行列であることを示せ。
3. 行列  $A$  とその擬似逆行列  $A^+$  に関して、行列  $E - A^+A$  は対称かつべき等行列であることを示せ。ただし、 $E$  は単位行列とする。
4. 行列  $A$  とその擬似逆行列  $A^+$  に関して、行列  $E - AA^+$  は対称かつべき等行列であることを示せ。ただし、 $E$  は単位行列とする。

## 本課題の狙い

擬似逆行列に関係する行列やその計算には、興味深い特性が潜んでいる。様々が特性を勉強しながら、擬似逆行列に慣れること、理解を深めることを期待する。

## 解答例

1. 擬似逆行列の定義式の1つから対称であることは明らか。

$$(AA^+)^2 = AA^+AA^+ = AA^+$$

なぜなら、定義式より  $AA^+A = A$  であるので。上式の結果より、 $AA^+$  を2乗して値は変化しないので、べき等行列である。



2. 擬似逆行列の定義式の1つから対称であることは明らか。

$$(A^+A)^2 = A^+A A^+A^+ = A^+A$$

なぜなら、定義式より  $A^+ A A = A^+$  であるので。上式の結果より、 $A^+A$  2乗して値は変化しないので、べき等行列である。

3.  $E - A^+A$ について、 $E$ は対称行列、 $A^+A$ も対称行列なので、 $E - A^+A$ は対称行列である。

$$\begin{aligned}(E - A^+A)^2 &= (E - A^+A)(E - A^+A) \\ &= E - A^+A - A^+A + A^+AA^+A \\ &= E - A^+A - A^+A + A^+A \\ &\quad (\ A^+ A A = A^+ \text{ より}) \\ &= E - A^+A\end{aligned}$$

2乗しても値は変化しないので、べき等行列である。

4.  $E - A A^+$ について、 $E$ は対称行列、 $A A^+$ も対称行列なので、 $E - A A^+$ は対称行列である。

$$\begin{aligned}(E - A A^+)^2 &= (E - A A^+)(E - A A^+) \\ &= E - A A^+ - A A^+ + A A^+A A^+ \\ &= E - A A^+ - A A^+ + A A^+ \\ &\quad (\ A A^+A = A \text{ より}) \\ &= E - A A^+\end{aligned}$$

2乗しても値は変化しないので、べき等行列である。

## 留意点

擬似逆行列の定義式に立ち返ることで、複雑な式も整理すると簡潔な表現になることがある点を記憶に留めておくこと。

## 課題

データサイエンス基礎コース 13 の内容を踏まえて下記の項目に解答せよ。(適宜, 参考書等を活用すること)

1. 平均に関する以下の問題に答えよ.

- (1) ある学校において, 1 組(30 人)の平均身長は 166.5cm, 2 組(35 人)の平均身長は 160.0cm であった. このとき, 1 組と 2 組の全学生における平均身長を求めよ.
- (2) ある土地の 1 年目~5 年目までの地価上昇率がそれぞれ, 5%, 10%, -8%, 5%, 2% であった. このとき, 年平均上昇率を求めよ.
- (3) 10km の道のりを, 行きは時速 20km, 帰りは時速 30km で往復した. このとき, 行きと帰りの平均時速を求めよ.

2. ある商店の商品 A の 1 日の売上数  $X$  とし, 商品 A が 1 日に  $k$  個売れる確率は

$$P(X = k) = e^{-3} \frac{3^k}{k!} \quad (k = 0, 1, 2, \dots)$$

で与えられる. ここで,  $0! = 1, e^{-3} = 0.05$  としてよい.

- (1) 商品 A の 1 日の売上数が 2 個以下である確率を求めよ.
- (2) 商品 A の売切れが起きる確率を 10% 以下にしたいとき, 商品 A をいくつ仕入れればよいか.

## 本課題の狙い

本課題は, 目的に応じて正しく平均を計算すること, 確率の公理や確率分布(確率(密度)関数)といった基本的な確率・統計学の知識に基づいて, 確率の計算または確率を伴う計算に取り組むことを狙いとしている.

## 留意点

設問 1 で扱っている平均は, 加重平均(重み付き平均), 幾何平均, 調和平均と呼ばれる. よく使用される(算術)平均との違いに注意が必要である. また, 設問 2 で与えた確率は, ポアソン分布と呼ばれ, 代表的な離散型分布の一つである.

## 解答例

1. (1) 求める平均は,

$$\frac{30}{30+35} \times 166.5 + \frac{35}{30+35} \times 160 = 163.$$

(2) 最初の地価を 1 とすると, 5 年後の地価は,

$$1 \times 1.05 \times 1.10 \times 0.92 \times 1.05 \times 1.02 = 1.138045.$$

したがって,  $1 \times (1 + (\text{年平均上昇率}))^5 = 1.138045$  となればよい. これを解くと,  $1 + (\text{年平均上昇率}) = \sqrt[5]{1.138045} = 1.0262$  より, 年平均上昇率は 0.0262, つまり 2.62%となる.

(3) 行きにかかった時間は  $10/20 = 1/2$  (時間), 帰りにかかった時間は  $10/30 = 1/3$  (時間)であるので, 往復でかかった時間は,  $1/2 + 1/3 = 5/6$  (時間)である. また, 往復での道のりは 20km. したがって, 往復の平均時速は,

$$\frac{20}{5/6} = 24 \text{ (km)}.$$

2. 商品 A の売上数を  $X$  とおくと,  $P(X = k) = e^{-3} \frac{3^k}{k!}$  ( $k = 0, 1, 2, \dots$ ) となる.

(1)

$$P(X \leq 2) = P(X = 0) + P(X = 1) + P(X = 2) = 0.425.$$

(2) 仕入れ数を  $a$  とすると, 売切れが起こる確率は,  $P(X > a)$  となる. したがって,

$$0.1 \geq P(X > a) = 1 - P(X \leq a) = 1 - \sum_{k=1}^a P(X = k)$$

をみたす最小の  $a$  を求めればよい. ここで,

$$\sum_{k=1}^4 P(X = k) \approx 0.819, \sum_{k=1}^5 P(X = k) = 0.920$$

より,  $a = 5$  のとき, 条件をみたすことがわかる.

## 課題

データサイエンス基礎コース 14 の内容を踏まえて下記の項目に解答せよ。(適宜, 参考書等を活用すること)

確率変数  $Z$  が平均 0, 分散 1 の正規分布に従うとする. このとき,  $P(Z \leq -a) = P(Z \geq a)$  ( $a \geq 0$ ) であり, 以下を満たす.

$$P(Z \leq 0.50) = 0.6915, P(Z \leq 1.50) = 0.8413, \\ P(Z \leq 1.64) = 0.9500, P(Z \leq 1.96) = 0.9750.$$

- ある会社で生産される商品の寿命時間  $X$  は平均 1000(時間), 分散 10000 の正規分布に従っているとす。このとき,  $Y = \frac{X - (\text{平均})}{\sqrt{(\text{分散})}} = \frac{X - 1000}{100}$  と変形すると,  $Y$  は平均 0, 分散 1 の正規分布に従うことは利用してよい.
  - (1) この商品の寿命が 1050 時間以下となる確率を求めよ.
  - (2) この商品の保証時間を見積もる. 商品の寿命が保証時間よりも短くなる確率を 5%以下とするためには, 保証時間としていくらと見積もればよいか.
- 数学と英語の試験(100 点満点)を 10000 人が受験した. このとき, 数学の点数は, 平均 60 点, 分散 100 の正規分布に従い, 英語の点数は, 平均 50 点, 分散 125 の正規分布に従う結果となった.
  - (1) 数学の試験で 75 点以上獲得した受験生は何人いるか.
  - (2) 合計点で上位 2.5%に入るためには, 合計点が何点あればよいか. ただし, 平均  $\mu_1$ , 分散  $\sigma_1$  の正規分布と平均  $\mu_2$ , 分散  $\sigma_2$  の正規分布を足したものが, 平均  $\mu_1 + \mu_2$ , 分散  $\sigma_1 + \sigma_2$  の正規分布に従うことは利用してよい.

## 本課題の狙い

設問 1 や設問 2 の(2)で挙げた正規分布の変形, 和に関する性質は, 性質は正規分布を扱う際に欠かすことができない性質である. 本課題では, これらの性質を利用した正規分布における確率の計算または確率を伴う計算を設定している.

## 留意点

設問 1 における変形  $\frac{X - (\text{平均})}{\sqrt{(\text{分散})}}$  は、標準化と呼ばれる。また、設問 2 の(2)における正規分布の和に関する性質を再生性と呼ぶ。

## 解答例

1. (1)

$$P(X \leq 950) = P\left(\frac{X - 1000}{100} \leq \frac{1050 - 1000}{100}\right) = P(Y \leq 0.5) = 0.6915.$$

(2) 保証時間見積もりを  $a$  (時間) とする。このとき、 $P(X < a) = 0.05$  となる  $a$  を求めればよい。

$$0.05 = P(X < a) = P\left(\frac{X - 1000}{100} < \frac{a - 1000}{100}\right) = P\left(Y < \frac{a - 1000}{100}\right).$$

ここで、 $P(Z > 1.64) = 1 - P(Z \leq 1.64) = 0.05$  かつ  $P(Z > 1.64) = P(Z < -1.64)$  より、上記を満たすためには、 $\frac{a - 1000}{100} = -1.64$  となればよい。したがって、 $a = 836$ (時間)。

2. (1) 数学の試験の点数を  $X$  とすると、75 点以上をとる確率は、

$$\begin{aligned} P(X \geq 75) &= 1 - P(X < 75) = 1 - P\left(\frac{X - 60}{10} < \frac{75 - 60}{10}\right) \\ &= 1 - P\left(\frac{X - 60}{10} < 1.5\right) \\ &= 1 - 0.8413 = 0.0668. \end{aligned}$$

受験者は 10000 人なので、75 点以上を獲得した受験生は  $10000 \times 0.0668 = 668$ (人) となる。

(2) 正規分布の再生性より、試験の合計点は、平均 110、分散 225 の正規分布に従う。試験の合計点を  $Y$ 、必要な点数を  $a$ (点) とすると、 $P(Y \geq a) = 0.025$  となる  $a$  を求めればよい。

$$0.025 = P(Y \geq a) = 1 - P(Y < a) = 1 - P\left(\frac{Y - 110}{15} < \frac{a - 110}{15}\right)$$

となるので、 $P\left(\frac{Y-110}{15} < \frac{a-110}{15}\right) = 0.9750$  となる  $a$  を求める。 $P(Z \leq 1.96) = 0.9750$  より、 $\frac{a-110}{15} = 1.96$  であり  $a = 139.4$ , つまり 140 点あれば上位 2.5%に入る。

## 課題

データサイエンス基礎コース 15 の内容を踏まえて下記の項目に解答せよ。（適宜、参考書等を活用すること）

1. 以下は、国語、英語、数学の 20 点満点の試験の結果(A さん~F さんの 6 人分)を表している。

	A	B	C	D	E	F
国語	12	8	9	14	5	6
英語	12	13	7	15	7	18
数学	11	8	11	7	13	16

(1) 各教科の(算術)平均と分散を求めよ。

(2) Pearson の意味で相関が最も強いのは、(国語, 英語), (国語, 数学), (英語, 数学)のうちどれか。

2. 以下は、6 組の家族における両親の身長(平均( $x$ , cm))と子どもの身長( $y$ , cm)を測定したものである。

両親( $x$ )	161	166	157	158	170	160
子ども( $y$ )	169	171	160	156	168	160

(1) Pearson の相関係数を求めよ。

(2)  $y_i = \alpha + \beta x_i + e_i$  ( $i = 1, 2, \dots, 6$ ) と想定したとき、最小二乗推定量  $\hat{\alpha}, \hat{\beta}$  を求めよ。ただし、 $e_1, e_2, \dots, e_6$  は誤差を表す。

## 本課題の狙い

本課題では、二種類以上のデータを取得できた際に、データ間の関係性を知る・表現することを目的としている。相関係数は、データ間の関係性を定量的に表すことができる指標となる。また、最小二乗推定による回帰直線の導出により、データ間の関係性を数式として表すことができる。



## 留意点

設問 1 の(2)及び設問 2 の(1)で対象としている Pearson の相関係数はデータ間の直線的な関係性を表すことができる指標である。つまり、 $x$  と  $y$  という二種類のデータがあった場合に、 $y = x$ ,  $y = -x$  といった関係性は数値として表すことができるが、 $y = x^2$  のような関係性は正確に表すことができない。

## 解答例

1.  $x$ : 国語,  $y$ : 英語,  $z$ : 数学 とおく。

$$(1) \text{ 平均: } \bar{x} = \frac{12+8+9+14+5+}{6} = 9, \bar{y} = \frac{12+13+7+15+}{6} = 12, \bar{z} = \frac{11+8+11+7+13+16}{6} = 11.$$

$$\text{分散: } S_{xx} = \sum_{i=1}^6 (x_i - \bar{x})^2 = 10, S_{yy} = \sum_{i=1}^6 (y_i - \bar{y})^2 = 16, S_{zz} = \sum_{i=1}^6 (z_i - \bar{z})^2 = 9.$$

(2) 国語と英語に関する Pearson の相関係数は、 $r_{xy} = \frac{S_{xy}}{\sqrt{S_{xx}S_{yy}}}$  で計算できる。

$$S_{xy} = \sum_{i=1}^6 (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) \text{ であることより, } r_{xy} \cong 0.21 \text{ となる.}$$

同様にして、国語と数学に関する Pearson の相関係数  $r_{xz} \cong -0.70$ 、英語と数学に関する Pearson の相関係数  $r_{yz} \cong 0.07$  となる。したがって、大きさ(絶対値)が最も大きいのは国語と数学の組み合わせである。

2. (1)  $\bar{x} = 162, \bar{y} = 164, S_{xx} = 21, S_{yy} = 31, S_{xy} = 19.16667$  より,

$$r_{xy} = \frac{S_{xy}}{\sqrt{S_{xx}S_{yy}}} = 0.7512.$$

(2)

$$\hat{\alpha} = \bar{y} - \hat{\beta}\bar{x} = 16.14,$$

$$\hat{\beta} = \frac{S_{xy}}{S_{xx}} = 0.91.$$

## 課題

データサイエンス基礎コース 16 の内容を踏まえて下記の項目に解答せよ。（適宜、参考書等を活用すること）

- (1)  $n$  個のデータ  $x_1, x_2, \dots, x_n$  が与えられ、これらのデータは、平均  $\mu$ 、分散  $\sigma^2$  の正規分布に従うとする。このとき、 $\mu$  と  $\sigma^2$  の最尤推定量  $\hat{\mu}, \hat{\sigma}^2$  を求めよ。ただし、データ  $x_i$  における確率密度関数を  $f(x_i; \mu, \sigma^2)$  とすると、 $\hat{\mu}$  と  $\hat{\sigma}^2$  は  $\sum_{i=1}^n \log f(x_i; \mu, \sigma^2)$  を最大とする値となる。  
  
(2) 喫煙の心臓活動への影響を調査するために、10 人(A さん~J さん)を無作為に選び喫煙の前後における 1 分間の脈拍の差(喫煙前の脈拍-喫煙後の脈拍)として以下のデータを得た。これらのデータは、平均  $\mu$ 、分散  $\sigma^2$  の正規分布に従うとする。このとき、 $\mu$  と  $\sigma^2$  の最尤推定量  $\hat{\mu}, \hat{\sigma}^2$  を求めよ。

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
-1	0	-2	3	-3	-1	-2	-4	1	-1

- とある製品を作る 2 台の機械 A, B があり、機械 A, B はそれぞれ 1%, 2% の割合で不良品を出す。また、全製品の 70% を機械 A, 30% を機械 B で製造している。
  - 1 個の製品を取り出したとき、それが機械 A から製造された不良品である確率を求めよ。
  - 1 個の製品を取り出し、それが不良品だったとき、この製品は機械 A, B のどちらから製造されたものであると推測できるか。

## 本課題の狙い

設問 1 では、最尤推定の手順を理解し、確率密度関数から最尤推定量の導出を行うこと、推定の対象(パラメータ)が複数存在する場合の最尤推定量の導出方法を知ることが狙いとしている。設問 2 においては、ベイズの定理を駆使して条件付き確率の計算に臨むことを目的とする。

## 留意点

ベイズの定理は、条件付き確率に関する定理であり、この定理を用いることによりベイズ推定の手法が構築される。最尤推定とベイズ推定は、どちらもパラメータの推定を可能とするが、最尤推定は推定値を一つの値として導出し、ベイズ推定は推定結果をパラメータの確率分布として導出する。

## 解答例

1. (1)

$$\sum_{i=1}^n \log f(x_i; \mu, \sigma^2) = \sum_{i=1}^n \left\{ -\frac{1}{2} \log(2\pi\sigma^2) - \frac{(x_i - \mu)^2}{2\sigma^2} \right\}.$$

上記を最大とする  $\mu$  と  $\sigma^2$  を求めるためには、 $\mu$  と  $\sigma^2$  で偏微分し  $= 0$  とした連立方程式を解けばよい。ここで、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mu} \sum_{i=1}^n \log f(x_i; \mu, \sigma^2) &= \sum_{i=1}^n \frac{x_i - \mu}{\sigma^2} = 0, \\ \frac{\partial}{\partial \sigma^2} \sum_{i=1}^n \log f(x_i; \mu, \sigma^2) &= \sum_{i=1}^n \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} + \frac{(x_i - \mu)^2}{2\sigma^4} \right\} = 0. \end{aligned}$$

連立方程式を解くと、 $\hat{\mu} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$ ,  $\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2$ .

(2) (1)より、 $\hat{\mu} = -1$ ,  $\hat{\sigma}^2 = 3.6$ .

2. A: 機械 A から製造, B: 機械 B から製造, F: 不良品 とおくと

$$P(A) = \frac{7}{10}, P(B) = \frac{3}{10}, P(F|A) = \frac{1}{100}, P(F|B) = \frac{2}{100}.$$

(1) 今求めたい確率は、 $P(A \cap F)$  である。ここで、

$$P(F|A) = \frac{P(A \cap F)}{P(A)}$$

であるので、

$$P(A \cap F) = \frac{7}{10} \times \frac{1}{100} = \frac{7}{1000}.$$

(2) ベイズの定理より、

$$P(A|F) = \frac{P(A)P(F|A)}{P(A)P(F|A) + P(B)P(F|B)} = \frac{7}{13}.$$

$$P(B|F) = \frac{P(B)P(F|B)}{P(A)P(F|A) + P(B)P(F|B)} = \frac{6}{13}$$

したがって, 機械 A から製造された可能性が高いと考えられる.

## 課題

単純パーセプトロンを Python または R で実装し、様々なデータセットに対して適用することでその性能を確認します。以下の課題を行なってください。

1. 重みベクトルの更新と学習終了を判定するプログラムを作ってください。
2. 学習データとして AND ゲートと XOR ゲートにおける値（真が 1, 偽が 0）を用いてパーセプトロンの学習を行い、その結果を比較して下さい。また、学習係数やデータの入力順序によって学習がどのように変わるか確認して下さい。

## 本課題の狙い

実際にプログラムとして実装することによりパーセプトロンの原理を理解する。また、どのようなニューラルネットワークを学習する場合においても問題となる学習率等のハイパーパラメータの調整や逐次学習に起因する問題点を理解する。

## 解答例

[R によるプログラム]

```
#入力
x <- matrix(c(-1,-1,-1,-1,0,1,0,1,0,0,1,1),nrow = 4,ncol=3) #データ
l_AND <- c(-1,-1,-1,1) #AND ゲートの出力
l_XOR <- c(-1,1,1,-1) #XOR ゲートの出力
w <- c(0,0,0) #重みベクトルの初期値
r <- 0.5 #学習係数

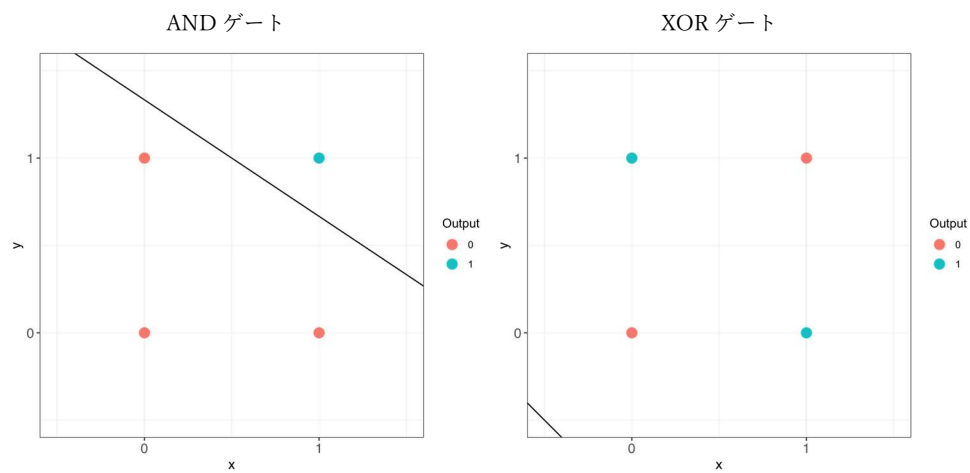
#重みベクトルの更新
update_w <- function(x, l, w) {
  if (sign(x %*% w) == sign(l)) {return(w)}
  return(w+r*x*l)
}
```

```

#学習
l<-l_AND #AND ゲートの学習. XOR ゲートの場合はl<-l_XOR とする
er<- 0.01 #収束を判定するための誤差変化の閾値
c<- 0
while (c < nrow(x)) {
  for (i in 1:nrow(x)) {
    estimate_w <- update_w(x[i,], l[i], w)
    if (norm(estimate_w-w,"2") < er) {
      c<- c+1
    } else {
      w <- estimate_w
      c<- 0
    }
  }
}

```

結果例



## 留意点

XOR ゲートのデータは誤差変化の閾値をある程度高くしないと学習が収束しないので、初学者に実施する場合は最初にその目安を教示する。

## 課題

Python または R を用いてピマ族の糖尿病に関するデータベースからの糖尿病の発症予測をナイーブベイズとロジスティック回帰で比較します。以下の課題を行なって下さい。

1. 交差判定法を用いて各分類手法の予測精度を評価して下さい。
2. 訓練に使うデータサイズを変化させた場合、両者にどのような違いが生じるか確認して下さい。

## 本課題の狙い

分類問題における生成モデル（ナイーブベイズ）と識別モデル（ロジスティック回帰）の挙動について理解する。また、分類器を構成する場合に、データサンプルの大きさがどのような影響を与えるのかを考察する。

## 解答例

R の caret パッケージを用いる例（交差検証）：

```
library(caret)
data("PimaIndiansDiabetes2", package = "mlbench")
PimaIndiansDiabetes2 <- na.omit(PimaIndiansDiabetes2)

#Naive Bayes
nb_fit <- train(diabetes~., data=PimaIndiansDiabetes2,
               preProcess = c("center", "scale"),
               trControl=trainControl(method='cv'),
               method='nb')
nb_pred <- predict(nb_fit, PimaIndiansDiabetes2)
confusionMatrix(nb_pred, PimaIndiansDiabetes2$diabetes)

#Logistic regression
lr_fit <- train(diabetes~., data=PimaIndiansDiabetes2,
```

```
preProcess = c("center", "scale"),
trControl=trainControl(method='cv'),
method='glm',
family="binomial")
```

```
lr_pred <- predict(lr_fit,PimaIndiansDiabetes2)
confusionMatrix(lr_pred,PimaIndiansDiabetes2$diabetes)
```

結果

混同行列：

ナイーブベイズ

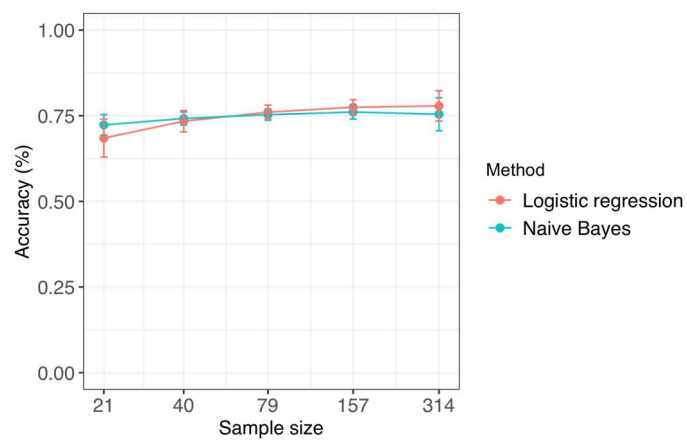
	Neg	Pos
Neg	220	45
Pos	42	85

Accuracy: 0.7781

ロジスティック回帰

	Neg	Pos
Neg	233	56
Pos	29	74

Accuracy: 0.7832



小サンプルではナイーブベイズの精度がよい

## 留意点

公開されている糖尿病データベースには欠損値があるので、そのチェックと欠損値を除く処理についても教示する。



## 課題

Python または R を用いてアヤメデータにおける特徴量の関係を可視化します。以下の課題を行なって下さい。

1. がく片と花弁の幅と長さそれぞれの組み合わせに対する散布図を作成して下さい。
2. 全ての特徴量を用いて主成分分析を行い、寄与率の高い2つの主成分を用いてそのスコアを図示して下さい。

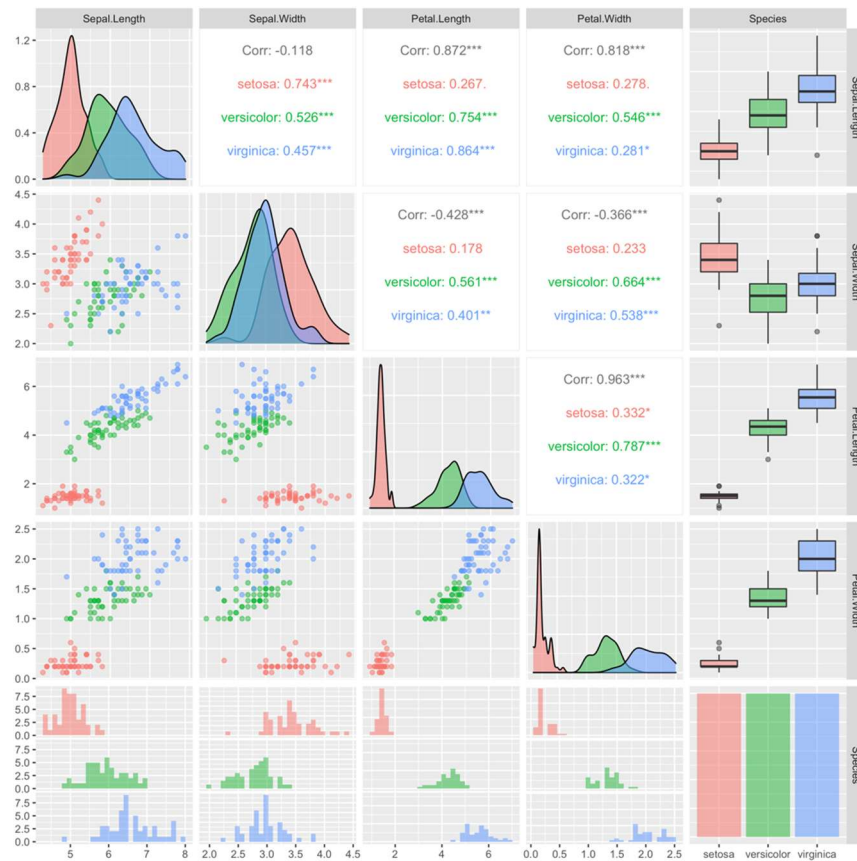
## 本課題の狙い

多次元データの代表的な可視化手法である主成分分析を理解する。

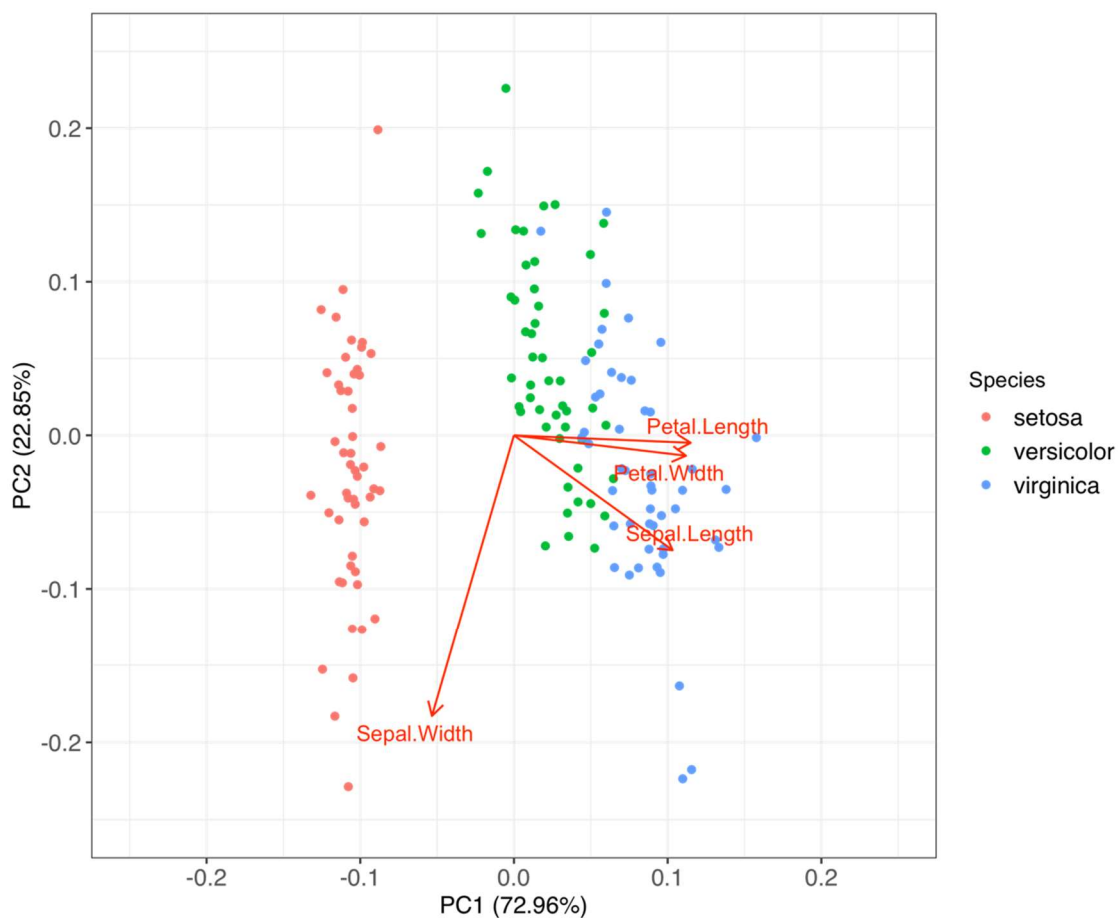
## 解答例

R による解析例：

散布図



## 主成分得点とバイプロット



## 留意点

主成分分析も含めて次元削減の手法は元データの構造を低次元に縮約したものを表示するため、実際のデータに含まれる特徴が全て図示されるわけではない。まずは散布図のような元データそのものの可視化したものを構成し、データ全体を眺めるといふことの重要性を強調する。

## 課題

統計的パターン認識の手法を評価する代表的な方法の ROC 解析を行います。脳動脈瘤破裂によるくも膜下出血の 113 症例のデータ (aSAH) について、Python または R を用いて以下の課題を行なって下さい。

1. 予後 (良または不良) を推測する特徴量として wfns (世界脳神経外科連合の重症度の分類)、および s100b と ndka (血清マーカー) を用いた場合の ROC 曲線を作成して下さい。
2. 血清マーカーを用いたロジスティック回帰モデルを構築し、その予測精度を ROC 解析で評価して下さい。

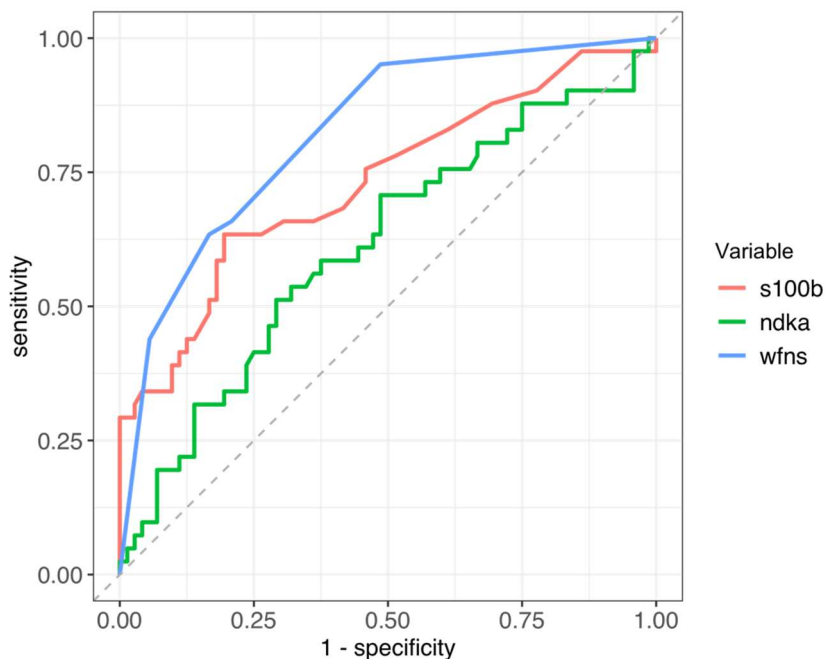
## 本課題の狙い

統計的パターン認識の代表的な評価法である ROC 解析を理解する。

## 解答例

R による解析例：

ROC 曲線 (wfns, s100b, ndka)

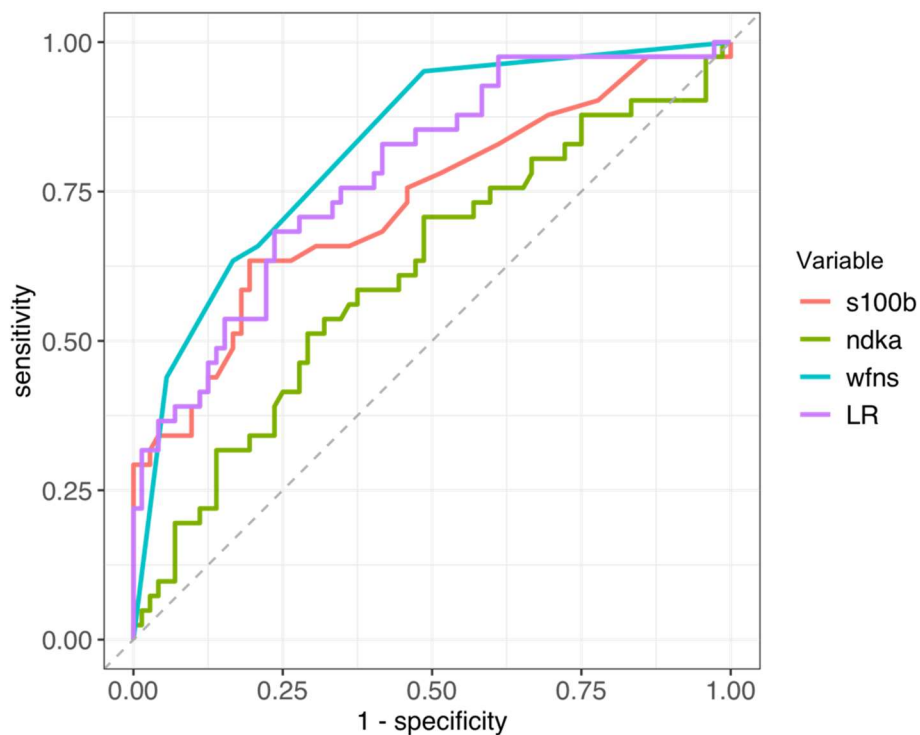


## ロジスティック回帰

```
lr_fit <- train(outcome ~ s100b + ndka, data = aSAH,
               preProcess = c("center", "scale"),
               trControl = trainControl(method = 'cv', classProbs = TRUE, summaryFunction = twoClassSummary),
               method = 'glm',
               family = "binomial",
               metric = "ROC")

pred_prob <- predict(lr_fit, aSAH, type = "prob")
result_prob <- data.frame(pred_prob, outcome = aSAH$outcome)
roc.lr <- roc(result_prob$outcome, result_prob$Good, quiet = TRUE)
```

## ROC 曲線 (wfns, s100b, ndka, LR: Logistic regression)



## 留意点

ROC 解析に絡めて、正確度・感度・特異度といった指標の意味、および Precision や Recall といった別の呼び方との対応について説明する。