スライドはwebで公開（パスワード認証付き）
http://www.bode.amp.i.kyoto-u.ac.jp/member/ohki/lec/num_analysis/

ログインＩＤ：NumericalComputation
パスワード：Handai2017

数値計算

（初回のみスライドで講義）

京都大学大学院情報学研究科
大木 健太郎
連絡先：　ohki@i.kyoto-u.ac.jp

第１回

- 講義の概要
- 計算機における数値表現と誤差

本日の内容

- 講義概要（成績評価，講義の進め方）
- 講義の内容
- 計算機における数値表現と誤差
- 次回以降の講義

講義の目的

- Webの検索エンジンや画像処理，株価の変動予測や物理現象などの数値シミュレーションなど， 日常的に利用するものから研究活動のような専門的な場面などの様々な状況で数値計算は使われている.
この授業では，以下の２つを中心に学ぶ
  - 数値計算アルゴリズム
  - アルゴリズムの収束性や誤差の評価

数値計算が使われる例
- 代数方程式のゼロ点の求解（最適化問題，etc）
- 固有値・特異値計算（検索エンジン）
- 連立一次方程式（画像処理，etc）
- 微積分方程式の計算（天気予報，物理学）

講義で用いる教科書

- 教科書：
  森 正武： 数値解析，第二版，共立出版（2002）
  - ✓ 内容は基礎的（数理的）
  - ✓ アルゴリズムは少し古め・・・
  - ✓ 主に４章までの内容を扱う

- 参考書は web に掲載
- 授業では教科書の範囲以上のことも扱う
  （ web にアップロードした資料も参考すること）

講義の進め方

- 基本は教科書に沿って，板書で行う予定
  - 初年度にアンケートをとった結果，
スライドよりも板書がよい学生が多数だったため
  - スライド資料を web 上で公開（板書と全く同じではないので注意）
http://www.bode.amp.i.kyoto-u.ac.jp/member/ohki/lec/num_analysis/
- 練習問題，過去問は web で公開予定
（試験対策に使ってください）

数値計算用ソフトウェア

レポート問題を解くためのソフトウェアは，特に指定しない．例えば，以下のソフトウェアは，行列計算によく用いられる．

- C言語 （フリー）
- Fortran （フリー）
- Python （フリー）
- Matlab （有償）
- Scilab （フリー）：講義でプログラム例を挙げるソフト
- Octave （フリー）
- MatX （フリー）

成績評価について

- 期末試験 ８０％　＋　レポート ２０％ の割合とし，以下の計算式で評価する※

min｛１００，
　（期末テスト）＋min｛（レポートの総和），２５｝｝

✓期末試験は手計算できる問題を中心
　✓過去問と解答例は講義の web ページに公開
✓レポートは数値問題中心
✓レポートは３～４回程度を予定

- レポート（答案用紙は返却しない）

※ 60点（合格点）に満たない場合で救済レポート（5点満点）を出した場合は，
下記で計算するかもしれない（過去の採点方法はこれ）

min｛（上記の点数）＋（救済），６０｝

参考：過去の試験の統計データ

年度	２０１３	２０１４	２０１５	２０１６
履修者数	８９人	７７人	９７人	５１人
受験者数	７０人	６６人	８０人	２４人
平均点	５６点	５２点	５８点	４４点
試験のみで合格	２９人	１９人	３８人	６人
最高点	１００点	８６点	８４点	１００点
最終合格者数（合格率）	５５人（７９％）	５９人（８９％）	７５人（９４％）	１６人（６７％）

※ 合格点は60点
※ 合格率＝合格者数／受験者数

レポートについて

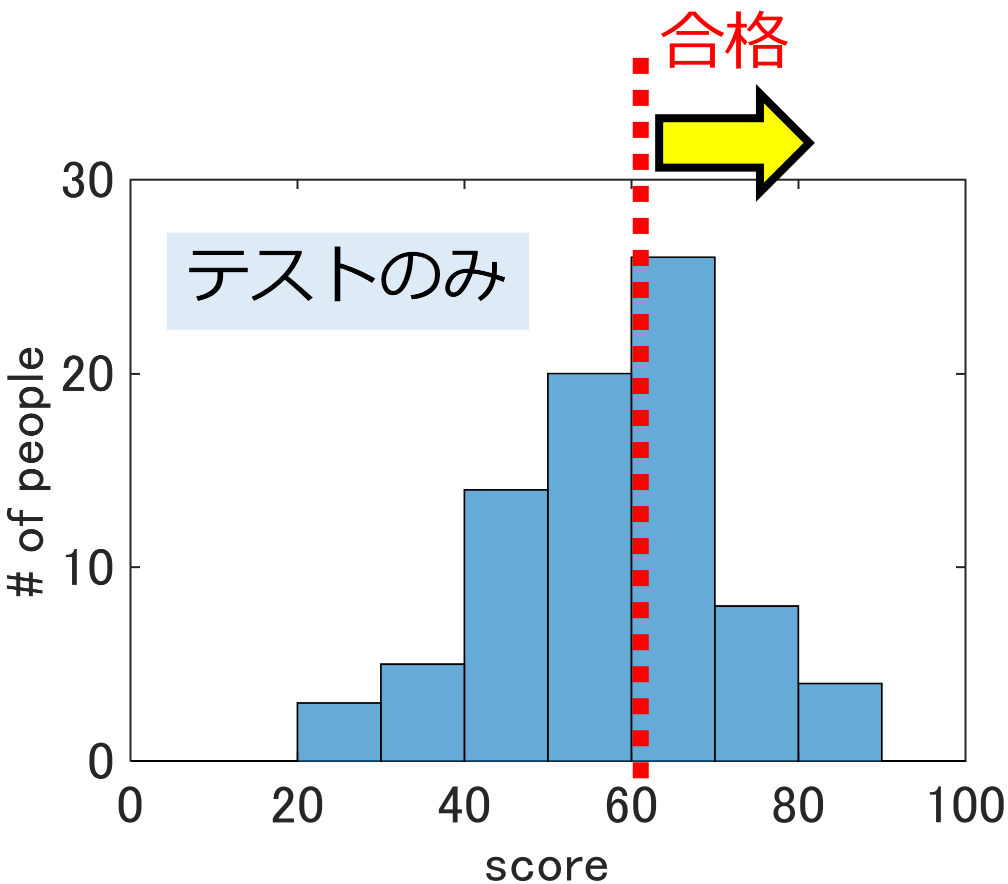
- コピペしない (昨今うるさいので)
  - 文章くらいは自分で書くこと
  - とくに間違っている解答をコピペしない
- 出席点にはならないので，白紙ならば提出しないこと
- 遅れて出す場合，レポートの点数は遅延日数に応じて指数関数的に減らす
- 採点はテストの採点と同時期に行う予定なので，学期中の成績に関する問い合わせには応じられない
- レポートは，友人等と共同で行うことを推奨する.
  - レポートには，一緒に作業した人の名前を書くこと

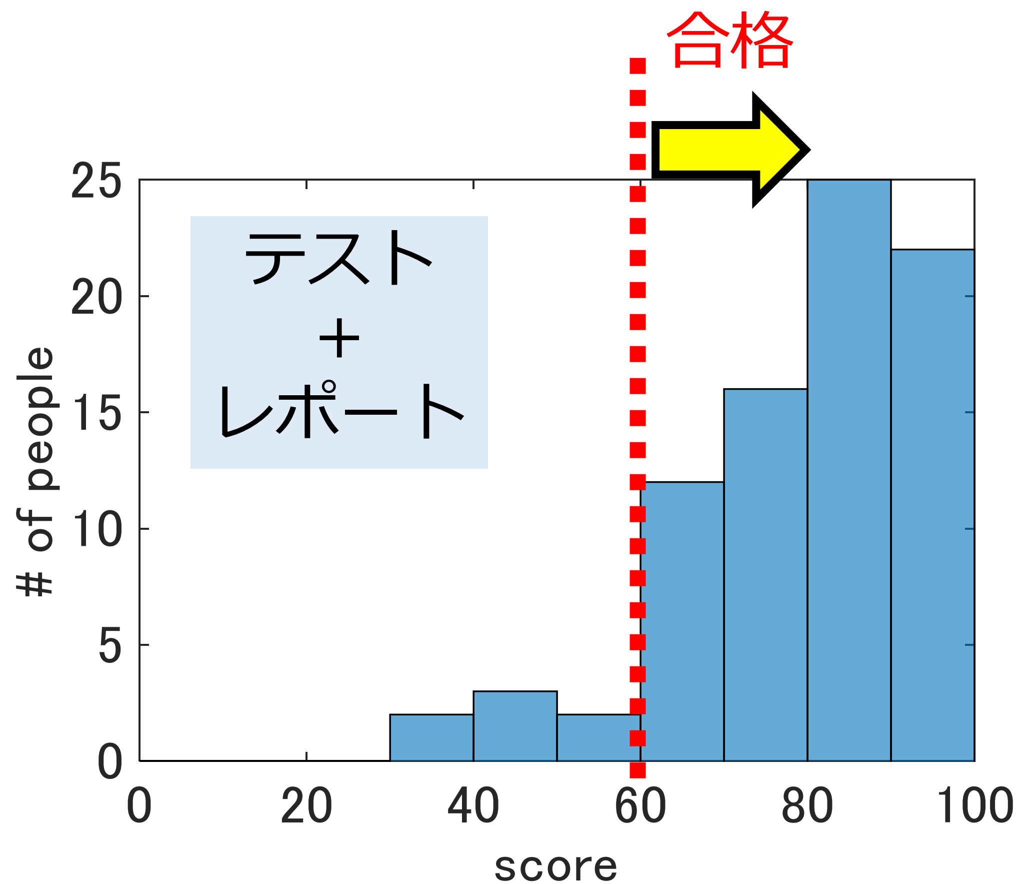
昨年あった例

- 他の人のレポートを写真で撮り，
  画像を印刷して提出（表紙のみ自筆）
  → それまでのレポート，試験の点数を全て０点
- 共同で行うことと，レポートを個別に提出することは，
  別であるので注意すること

参考：2015年度の成績結果

レポートは最大２５点の加点





本日の内容

- 講義概要（成績評価，講義の進め方）
- 講義の内容
  - 簡単な紹介
  - 数値計算を用いた例
- 計算機における数値表現と誤差
- 次回以降の講義

講義で扱う問題

- 数値計算 (numerical computation)
  数理モデル化された問題の計算法
- 数値解析 (numerical analysis)
  数値計算の理論（誤差解析，安定性など）

（例１）連立一次方程式

$$Ax = b, \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \ x \in \mathbb{R}^{n}, \ b \in \mathbb{R}^{m}$$

（例２）非線形問題，補間問題

$$f(x) = 0$$

（例３）固有値問題，特異値問題

$$Ax = \lambda x$$

なぜ数値計算が重要か

- （誤差の許される範囲で）計算間違いがない，計算結果に再現性がある

- 原理的には解けるが，解き方が分かっていない
  （例）非線形の微分方程式の解など

- 原理的に解け，解き方も分かっているが，手計算では厳しい
  （例）100万×100万の行列の固有値問題など

例：最適制御問題（線形二次評価関数）

(1) 制御対象のダイナミクスを線形方程式で近似し，
(2) 制御性能を適当な評価関数で評価する．

$$\min_u \int_0^\infty \left(x(t)^\top Q x(t) + u(t)^\top R u(t) \right) dt$$

$$R = R^\top > 0,\ Q = Q^\top \geq 0$$

s. t. $\dfrac{d}{dt} x(t) = Ax(t) + Bu(t),\ A \in \mathbb{R}^{n \times n},\ B \in \mathbb{R}^{n \times m}$

$$\Rightarrow\ u(t) = -R^{-1} B^\top P x(t)$$

代数 Riccati 方程式の解

$$A^\top P + PA - PBR^{-1}B^\top P + Q = 0$$

解析的に解く方法が見つかってない

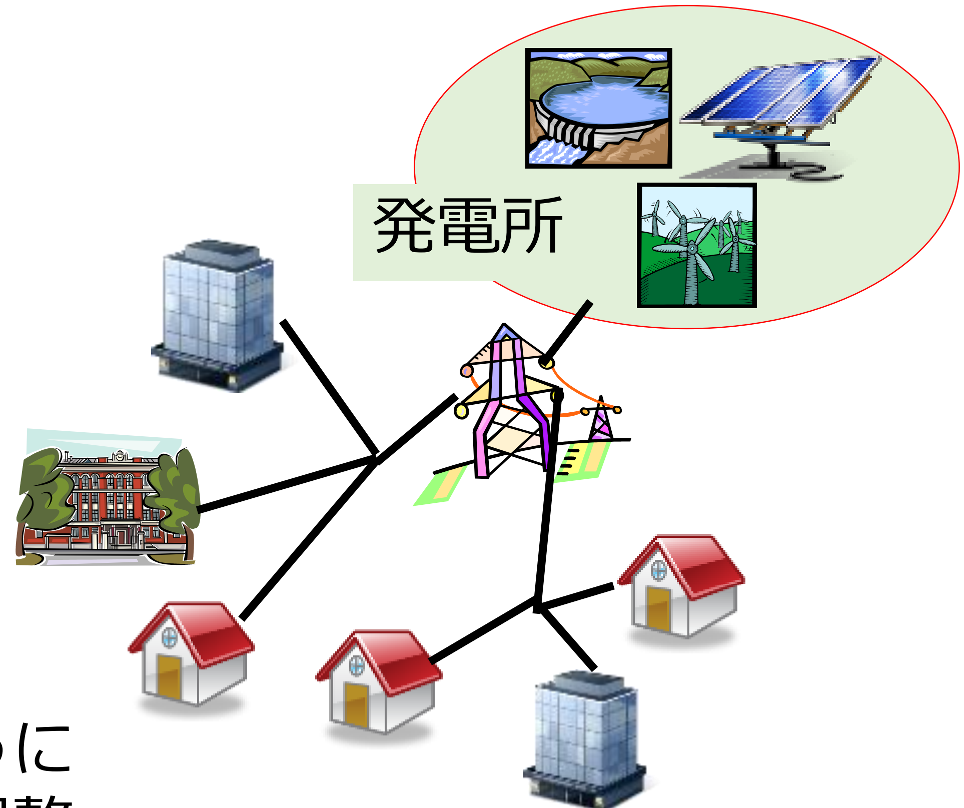
例：電力網の問題：電圧変動の安定性

発電機の線形化ダイナミクス
＋
キルヒホッフの法則

$$\frac{d}{dt}x = {\color{red}A}x$$

固有値の実部が負になるように
発電機内部のパラメータを調整

数万次元の行列・・・



谷口 編：電力システム解析，第11章，オーム社 (2009)

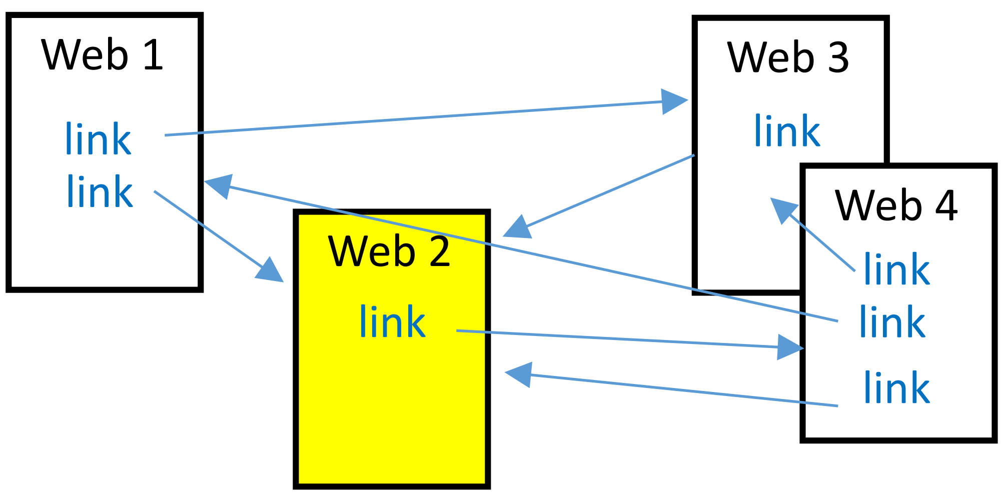
例：Google PageRank

- PageRank：Google 社の採用している
  Web ページの重要度決定のアルゴリズム

大雑把に言うと,

✓ たくさんリンクが張られているページは，重要である

✓ 重要なページからリンクの張られているページは重要度が高い



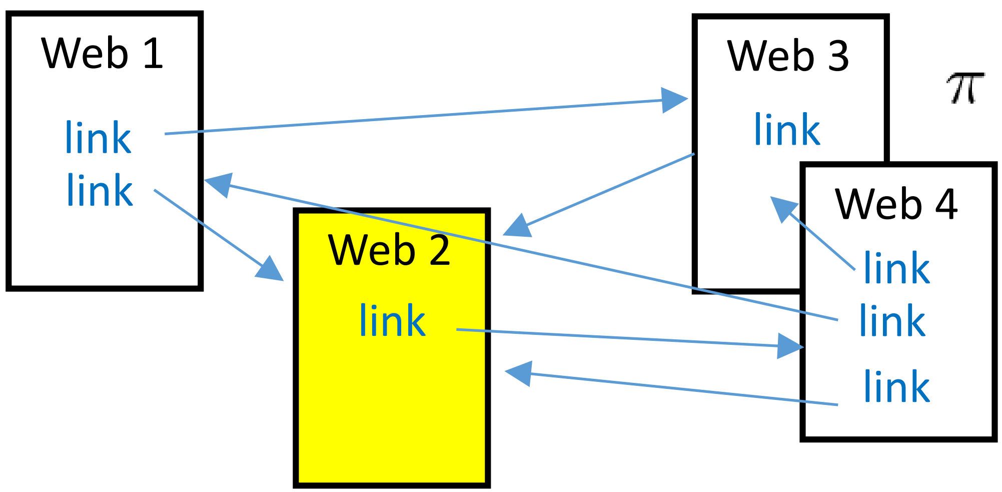
Langville and Meyer: Google PageRankの数理, 共立出版 (2009)

例：Google PageRank

π ：PageRank ベクトル 要素の大きな順に検索結果が表示される

- 固有ベクトル問題 $\pi^\top = \pi^\top G,\ \pi^\top \vec{1} = 1$
- 連立一次方程式 $\pi^\top (I - G) = 0,\ \pi^\top \vec{1} = 1$

81億次元の疎行列（Google行列）



$$\pi = (0.3,\ 0.4,\ 0.2,\ 0.1)$$

Langville and Meyer: Google PageRankの数理, 共立出版 (2009)

本日の内容

- ❖講義概要（成績評価，講義の進め方）
- ❖講義の内容
- ❖計算機における数値表現と誤差
- ❖次回以降の講義

数値計算と誤差

- 数値計算：
  計算機が処理できる“数”で，数を表現
  - 誤差が発生
    - 丸め誤差 ：（例えば）四捨五入による誤差
    - 打ち切り誤差 ：計算機が扱える範囲を超える誤差
    - 桁落ち：有効数字の減少

計算機の数の表現

- 数の表現：浮動小数点数 (floating point number)

N 進 *t* 桁の浮動小数点数

指数

$$\underbrace{+.d_1 d_2 \cdots d_t}_{\text{仮数部}} \times \underbrace{N^q}_{\text{指数部}}$$

$$0 < d_1 \leq N-1,\ 0 \leq d_i \leq N-1,\ i = 2, \cdots, n$$

（例） 0.25の表現

10 進 3 桁の浮動小数点数

$$+.250 \times 10^0$$

2 進 3 桁の浮動小数点数

$$+.100 \times 2^{-1}$$

4 進 2 桁の浮動小数点数

$$+.10 \times 4^0$$

浮動小数点数の計算例

$$\pm .d_1 d_2 \cdots d_t \times N^q = \pm \sum_{i=1}^{t} d_i N^{q-i}$$

$$0.25 = 2 \times 10^{-1} + 5 \times 10^{-2} + 0 \times 10^{-3}$$ 10進3桁

10進数

$$= 1 \times 2^{-2} + 0 \times 2^{-3} + 0 \times 2^{-4}$$ 2進3桁

$$= 1 \times 4^{-1} + 0 \times 4^{-2}$$ 4進2桁

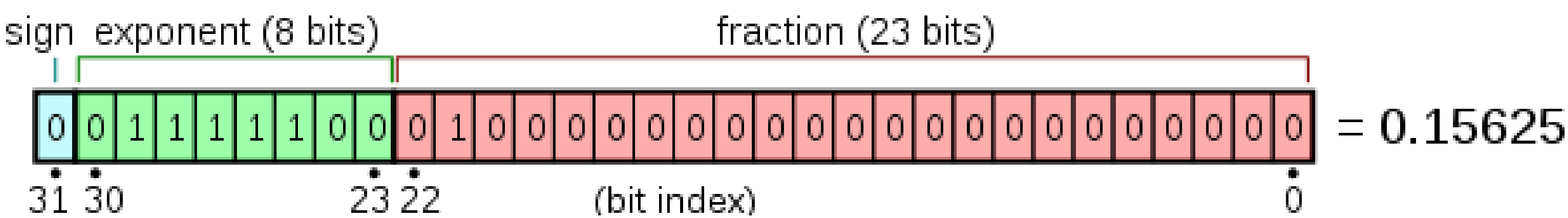
広く用いられている浮動小数点数

- **IEEE 754 standard**

国際規格として広く使われている

浮動小数点数 $+.d_1 d_2 \cdots d_t \times N^q$

32ビット単精度の場合



浮動小数点数と誤差

- 浮動小数点数では厳密に表せない数
  - 無理数（Napier 数，円周率など）
  - 他の浮動小数点数表現への変換

$$e \approx 0.271 \times 10^1$$

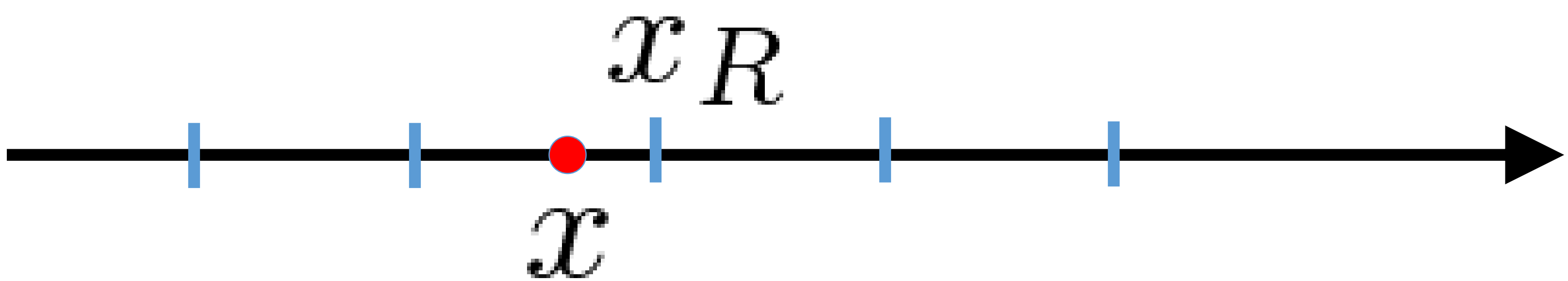
10 進 3 桁の浮動小数点数

$$0.300 \times 10^1 \approx 0.111 \times 2^1 = 0.275 \times 10^1$$

10 進 3 桁　　2 進 3 桁　　10 進 3 桁

丸め誤差

- 浮動小数点数では表せない数値は，
  誤差を必ず有する（丸め誤差）
- 数値を2つの浮動小数点数の近いほうに置き換える（四捨五入の精神）



丸め誤差の評価

定理 1.5

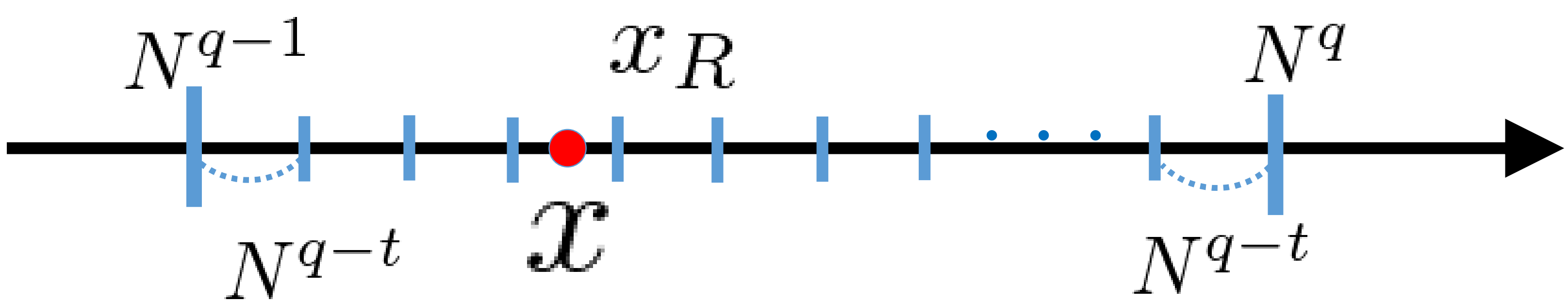
$$|x - x_R| \le \frac{1}{2}|x|N^{1-t}$$

N 進 *t* 桁の浮動小数点数

$$x \neq 0$$

➡ $N^{q-1} \le |x| < N^q$ を満たす q が存在

➡ $|x - x_R| \le \dfrac{1}{2}N^{q-t} \le \dfrac{1}{2}|x|N^{1-t}$



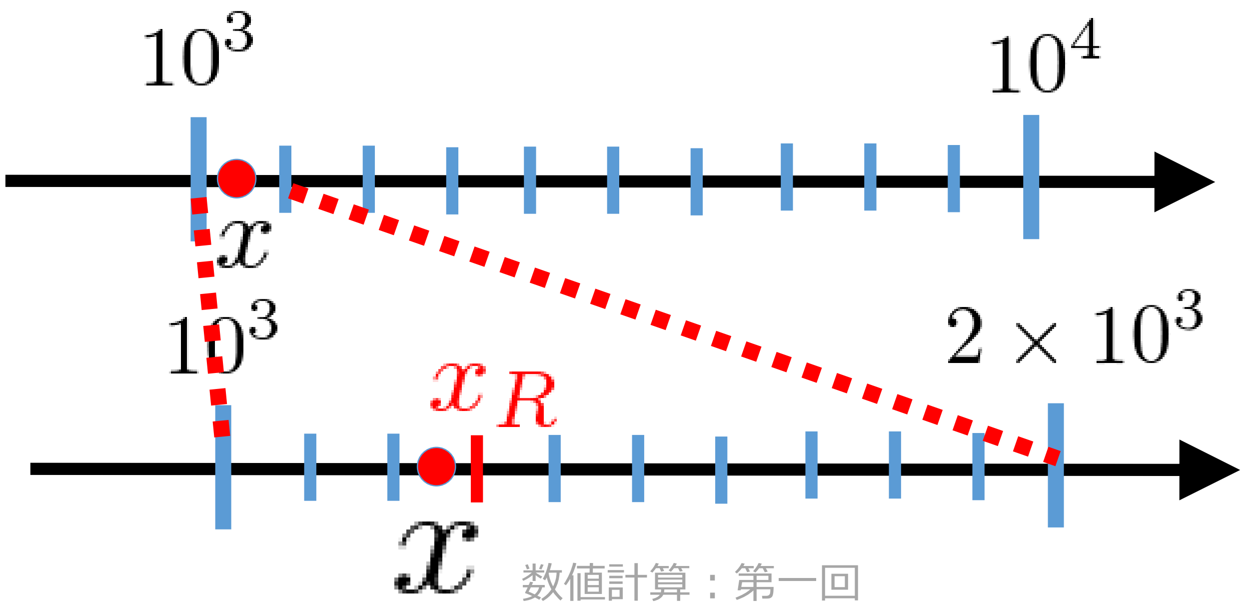
浮動小数点数の具体例

- 例１：10 進 3 桁で $x = 1025.1$ を表現

$$10^3 \leq |x| < 10^4 \quad \Rightarrow \quad q = 4$$

$$.d_1 d_2 d_3 \times 10^4 = d_1 \times 10^3 + d_2 \times 10^2 + d_3 \times 10^1$$

$$\Rightarrow \quad x_R = 1030$$



$$N^{q-t} = 10$$

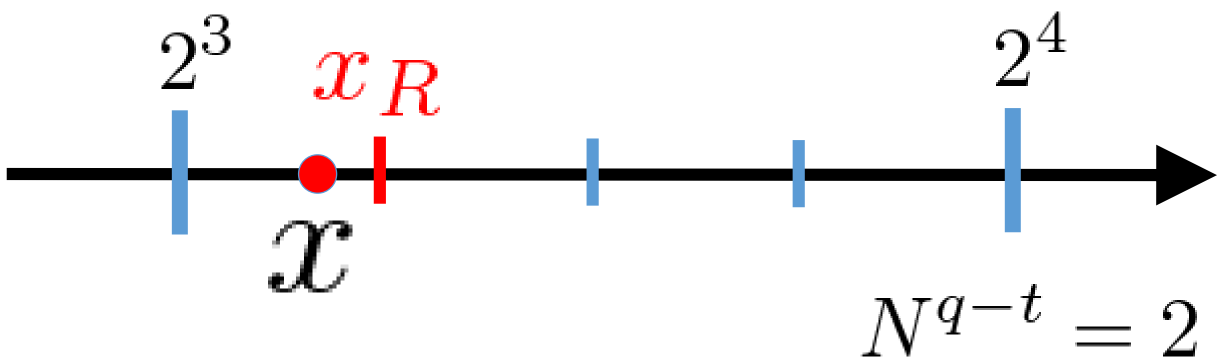
浮動小数点数の具体例

- 例２： 2 進 3 桁で $x = 9.7$ を表現

$$2^3 \leq |x| < 2^4 \quad \Rightarrow \quad q = 4$$

$$.d_1 d_2 d_3 \times 2^4 = d_1 \times 2^3 + d_2 \times 2^2 + d_3 \times 2^1$$

$$\Rightarrow \quad x_R = 1 \times 2^3 + 0 \times 2^2 + 1 \times 2^1 = 10$$



打ち切り誤差（情報落ち）

- 極端に大きな値と小さな値を加算・減算した際に生じる誤差
  - 例：10進3桁の足し算

$$135 = +.135 \times 10^3,\ 2.9 = +.290 \times 10^1$$

$$135 + 2.9 = 137.9 \approx +.137 \times 10^3 = 137$$

扱える範囲を超えると，打ち切られる

桁落ち

- ほとんど等しい数値の減算で生じる
  仮数部の情報落ち

N 進 *t* 桁の浮動小数点数 $\underbrace{+.d_1 d_2 \cdots d_t}_{\text{仮数部}} \times N^q$

$$0 < d_1 \leq N-1,\ 0 \leq d_i \leq N-1,\ i = 2, \cdots, n$$

10 進 6 桁

$$0.215289 \times 10^3 - 0.215274 \times 10^3 = 0.15000 \times 10^{-1}$$

有効数字が少なくなる（6 桁 → 2 桁）

桁落ちの問題

- 有効数字の減少

10 進 5 桁の浮動小数点数

$$\pi = 3.14159265358979\cdots \approx 0.31416 \times 10^{1}$$

十分大きな桁数で計算

$$(\pi - 3.14) - 0.54527 \times 10^{-4} = 0.001537473\cdots$$

$$\approx 0.15375 \times 10^{-2}$$

$$\pi - 3.14 \approx 0.15000 \times 10^{-2}$$

浮動小数点数の計算

$$(\pi - 3.14) - 0.54527 \times 10^{-4} \approx 0.15000 \times 10^{-2} - 0.54527 \times 10^{-4}$$

$$\approx 0.14454 \times 10^{-2}$$

丸めこまれた値に対して計算しても意味がない

丸め誤差と打切り誤差の影響

当たり前の不等式

$$(a-b)^2 \geq 0 \ \Leftrightarrow \ a^2+b^2 \geq 2ab, \ \forall a,b \in \mathbb{R}$$

10 進 5 桁の浮動小数点数

$$a = 2.0339, \ b = 2.0406$$

$$\Rightarrow \begin{cases} a^2 \approx 4.1367, \ b^2 \approx 4.1640, \ 2ab \approx 8.3008, \\ a^2+b^2 \approx 8.3007 \end{cases}$$

実数の不等式が
成り立つとは限らない

数値計算と誤差

- 数値計算アルゴリズムは誤差との闘い
- 丸め誤差や桁落ち，情報落ちの影響を考えたアルゴリズムを考えなければならない
    - 誤差がない場合に正しく解を与えるアルゴリズム
    - 誤差の評価： 関数解析的アプローチ（ノルム，不等式）

講義で主に扱う内容

本日の内容

- 講義概要（成績評価，講義の進め方）
- 講義の内容
- 計算機における数値表現と誤差
- 次回以降の講義
  - 教科書範囲外の内容
  - 次回の講義

教科書の範囲外の内容（予定）

- 機械学習で用いられるアルゴリズム
  - サポートベクターマシン 他
- 最近の線形計算アルゴリズムの結果
  - dqds法：特異値分解アルゴリズムに用いられている
  - 丸め誤差の精度保証計算
- 特異値計算　（未定）
  - 特異値の計算アルゴリズム＝物理現象の差分方程式
- 大規模疎行列の固有値問題　（時間があれば）

次週の内容

- 連立一次方程式の解法（１）
  （教科書1.5節～1.8節）
  - 方程式の近似誤差　（教科書 1.5 節）
  - 連立方程式の直接解法　（教科書 1.6 節）
    - Gaussの消去法，LU分解
    - 丸め誤差の評価　（※　教科書の範囲外）
- 第一回レポート課題の提示
  - 浮動小数点数による加減算，誤差の解析，
    連立一次方程式の直接法，間接法を予定

成績評価法（再掲）

- 期末試験 ８０％　＋　レポート２０％
  - 期末試験は手計算できる問題
    どのような問題かは，参考までに昨年度までの試験問題のいくつかを授業で取り上げる
  - レポートは数値問題中心
  - レポートは３回程度を予定
- 出席は取る予定なし
- レポート・答案用紙は返却しない

ログインＩＤ：NumericalComputation
パスワード：Handai2017