- 必須：指定された表紙をつけ，氏名，所属，学籍番号を明記すること．
- 必須：特に指定のない限り，A4 用紙で提出すること．
- 印刷の場合はなるべく両面印刷にすることを推奨する．
- 計算機で計算した場合，用いたプログラムをレポートには載せる必要はない．
- 問題に明らかな誤植がある場合は，訂正して解いてよい．ただし，訂正箇所と訂正後の文を明記すること．
- 解けない場合は，"問題の意味がなくならない程度"に，自分が解けるまで問題を易しく変更してよい．ただし，その旨を明記すること．その場合，作成した問題に応じて点数は割り引く．
- とくに指定されない場合，途中計算は使っているソフトウェアのデフォルトの浮動小数点数で計算し，結果は 10 進 3 桁の浮動小数点数で表すこと．
- レポート課題は，複数人（学生，先輩，研究員など，誰でも可）で解いてもよい．
- 必須：複数人で解く場合，一緒に取り組んだ人の名前を記載すること（これは礼儀です）．名前を間違えた場合は，減点する．

1　直接法による数値計算と厳密解

次の連立一次方程式の問題は，

- 浮動小数点数表示として IEEE754,
- 数値計算ソフトとして Matlab(R2011b),
- 数値解法として直接法

を用いた場合（要するにマニュアル通りの解法を用いた場合），**正しい解を与えなかったこと**で有名な問題である [*1].

問題 1.

次の係数を用いたときの $Ax = b$ の厳密解は，$x_* = (205117922,\ 83739041)^\top$ である．計算機を用いて，直接法で次の解を求めよ．

$$A = \begin{bmatrix} 64919121 & -159018721 \\ 41869520.5 & -102558961 \end{bmatrix},\ b = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{1}$$

用いた計算機の OS とバージョン，CPU，メモリおよびソフトウェアも明記すること．解が真値と異なる場合，なぜうまく求められないかを説明し，どのように改善すべきかを示せ．

例えば，マシンイプシロンと条件数の関係を調べてみるとよい．用いる計算機やソフトウェアで解が異なる場合があるので，複数の計算機やソフトウェアで試してみるとよい．例えば Scilab では，`A\b` と打てばよい．`inv(A)*b` とも解が異なる場合があるので，できれば考察すること．

問題 2.

正則な 2×2 の実行列 A と 2 次元の実ベクトル b を用いて，Gauss の消去法で連立一次方程式を解くことを考える．問題 1 とは別に，自分が用いている計算機とソフトウェアでは正しい解を返さない，A と b の組み合わせを作成せよ．用いた計算機の cpu，メモリ，およびマシンイプシロン

[*1] U. W. Kulisch and W. L. Miranker: "The arithmetic of the digital computer: A new approach," SIAM Review, vol. 28, pp. 1–40 (1986).

も記述すること.

2　反復法

反復法とは，連立一次方程式 $Ax = b$ を次の形で回帰的に解く数値計算法である.

$$x^{(k+1)} = Mx^{(k)} + Nb \tag{2}$$

ただし，$\det(A) \neq 0$ とする．ここで M と N は,

$$N^{-1}(I - M) = A \tag{3}$$

を満たす係数行列である．係数の選び方は，上の関係を満たし，かつ行列 M の固有値の絶対値で最大のもの $\rho(M)$ が，$\rho(M) < 1$ を満たすように作る必要がある．講義では，よく用いられる次の 3 つの反復法を紹介した.

Jacobi 法：　$M_J = -D^{-1}(E + F)$, $N_J = D^{-1}$.
Gauss–Seidel 法：　$M_G = -(D + E)^{-1}F$,　$N_G = (D + E)^{-1}$.
SOR 法：　$M_\omega = (I+\omega D^{-1}E)^{-1}\{(1-\omega)I-\omega D^{-1}F\}$,　$N_\omega = \omega(D+\omega E)^{-1}$. ただし, $\omega \in (0, 2)$.

ここで D, E, F は，それぞれ対角行列，狭義下三角行列，狭義上三角行列であり，A を次で分解して定義される.

$$A = D + E + F$$

2.1　反復法で解が求められる場合

一般的な正則行列に対し，反復法が収束するように行列 M を設定することは難しい．しかし，次の問題に見るように，正定値行列に対しては，Gauss–Seidel 法と SOR 法で収束することが知られている.

問題 3 (正定値行列に対する反復法)**.**
次の行列およびベクトルを用いた連立一次方程式 $Ax = b$ を考える.

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 5 & 1 & 1 \\ 3 & 1 & 9 & 1 \\ 4 & 1 & 1 & 10 \end{bmatrix},\ b = \begin{bmatrix} 5 \\ 1 \\ 11 \\ 0 \end{bmatrix}$$

このとき，以下の問に答えよ.

(1) $\rho(M_J)$, $\rho(M_G)$ および $\rho(M_\omega)$ を求めよ．ω は開区間 $(0, 2)$ の中から 1 つ選ぶこと.
(2) Jacobi 法，Gauss–Seidel 法，SOR 法を用いて，それぞれ 10 ステップ計算し，得られた近似解 $x^{(10)}$ を答えよ．ただし，初期値 $x^{(0)}$ はゼロベクトルにすること． SOR 法は，加速パラメータ ω を適当に設定すること.
(3) SOR 法で，収束が最も早くなる ω を求めよ．解析的に行うことが難しい場合は，開区間 $(0, 2)$ の間で適当に値をとり，10 ステップ後に最も真値に近くなった ω を答えよ.

一般に，正定値行列の仮定は厳しいものではない.

問題 4.

(1) 正則行列 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ に対し，$A^\top$ を左からかけることで，$A^\top A$ が正定値対称行列になることを示せ．（したがって，$Ax = b$ は $A^\top Ax = A^\top b$ と置くことで，いつでも正定値行列で考えることができる．）

(2) 正定値行列に対して，Gauss–Seidel 法 と SOR 法 ($\omega \in (0,2)$ ならば ω は何でもよい) は収束が保証される．これを証明せよ．

したがって，正則行列 A を用いた連立一次方程式は，いつでも正定値対称行列に変換することができる．ただし，余計に計算を行うため，数値計算精度は少し落ちる．そのため，大規模行列に対しては不向きな手法である．

ここで，再び問題 1 を考えてみよう．

問題 5.

行列 A および縦ベクトル b が (1) で与えられているとする．このとき，反復法を用いた際の連立一次方程式 $Ax = b$ の解を求めたい．次の 2 つの手法で 10 ステップ繰り返したときの解を答え，真値 x_* との違いを相対誤差

$$e = \frac{\|x^{(10)} - x_*\|_2}{\|x_*\|_2}$$

で評価せよ．

(1) Gauss–Seidel 法.

(2) SOR 法．ただし ω は適当に選び，明記すること（$\omega = 1$ は除く）．

2.2　推定問題と反復法

Jacobi 法

$$x^{(k+1)} = M_J x^{(k)} + N_J b$$

は，次のように書き換えることができる．

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} =& - D^{-1}(A-D)x^{(k)} + D^{-1}b \\ =& x_k + D^{-1}(b - Ax^{(k)}) \\ =& x_k + D^{-1}r^{(k)} \end{aligned}$$

ここで $r^{(k)} := b - Ax^{(k)} = A(x_* - x^{(k)})$ である．

問題 6.

次の反復法を，

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \Gamma r^{(k)}$$

の形式に書き直し，それぞれに対応する行列 Γ を求めよ．

(1) Gauss–Seidel 法：$M_G = -(D+E)^{-1}F, \quad N_G = (D+E)^{-1}$.

(2) SOR 法：$M_\omega = (I+\omega D^{-1}E)^{-1}\{(1-\omega)I - \omega D^{-1}F\}, \quad N_\omega = \omega(D+\omega E)^{-1}$.

(3) 一般の反復法：ただし，行列 M, N をそれぞれ式 (3) を満たすものとする.

反復法を別の視点から調べるために，連立一次方程式の問題を，次の回帰方程式で書き直してみよう.

$$\begin{cases} x_*^{(k+1)} = x_*^{(k)}, \quad x_*^{(0)} = x_* \\ y^{(k)} = Ax_*^{(k)} \end{cases}$$

$y^{(k)} = Ax_* = b$ であることに注意されたい．この $y^{(k)}$ は，システムからの出力である．ここで反復解法は，元の回帰方程式に，修正項を次のように加えた式で表す.

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \Gamma r^{(k)}$$

これは，線形システム制御理論における，状態観測器（オブザーバ）と呼ばれる回帰方程式である．これは運動方程式に含まれる一部の物理量しかセンサで観測できない場合に，全ての物理量の値を間接的に知るための推定法である．ここで

$$\delta x^{(k)} := x_*^{(k)} - x^{(k)}$$

とおくと，

$$\delta x^{(k+1)} = (I - \Gamma A)\delta x^{(k)} \tag{4}$$

を得る．この誤差方程式 (4) が収束するには，$\rho(I-\Gamma A) < 1$ となることが必要十分条件であるので，Γ をうまく設計することが求められる．ここで正方行列 $X \in \mathbb{R}^{n\times n}$ の固有値 μ_i, $i = 1, 2, \cdots, n$ に対して $\rho(X) := \max_i |\mu_i|$.

問題 7.

次の行列とベクトルを用いた連立一次方程式 $Ax = b$ を考える.

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 1 & -1 \\ 3 & 2 & 2 \\ 2 & -1 & -5 \end{bmatrix}$$

このとき，次の反復法が収束するかどうか，$I - \Gamma A$ の固有値を調べて答えよ.

(1) Jacobi 法を用いた場合.

(2) Gauss–Seidel 法を用いた場合.

(3) SOR 法を用いた場合.

3　逐次最小化法

3.1　最急降下法

連立一次方程式 $Ax = b$ の解を x_* で表し，

$$S(x) := \frac{1}{2}(x - x_*)^\top A^\top A(x - x_*) \tag{5}$$

とする．このとき，A が正則であれば，$A^\top A$ は正定値行列である．$Q = A^\top A$ とすれば，正定値行列 Q を使ってノルムを次のように定義できる．

$$\|x\|_Q := \sqrt{x^\top Qx}$$

最急降下法とは，次の規則で反復し，解を求める手法のことである．

$$x^{(k+1)} = \phi(x^{(k)}), \quad \phi(x^{(k)}) = x^{(k)} + \frac{(r^{(k)})^\top r^{(k)}}{(r^{(k)})^\top Qr^{(k)}} r^{(k)}, \quad r^{(k)} = (A^\top b - Qx^{(k)})$$

次の問題は，[杉原，室田 : 線形計算の数理，岩波書店 (2009)] の問題 4.1 である．

問題 8 (最急降下法の収束の評価)**.**

最急降下法の収束の評価は，次のように表せる．

$$S(x^{(k+1)}) \leq \left(\frac{\kappa_2(Q)-1}{\kappa_2(Q)+1}\right)^2 S(x^{(k)}) \tag{6}$$

ここで $\kappa_2(Q)$ は，2 ノルムの誘導ノルムで測ったときの行列 Q の条件数である．この不等式 (6) を，次の手順で示せ．

(1) $S(x^{(k)}) = \dfrac{1}{2}(r^{(k)})^\top Q^{-1} r^{(k)}$ および $S(x^{(k)}) - S(x^{(k+1)}) = \dfrac{1}{2}\dfrac{((r^{(k)})^\top r^{(k)})^2}{(r^{(k)})^\top Qr^{(k)}}$ を示せ．
(ヒント : $x - x_* = Q^{-1}(Qx - Qx_*)$ を用いるとすぐ出る)

(2) 一般に Q が正定値行列のとき, Q の条件数を用いて $x^\top Qx \cdot x^\top Q^{-1}x \leq \dfrac{(\kappa_2(Q)+1)^2}{4\kappa_2(Q)}(x^\top x)^2$ となる．この関係式と上の関係式を用いて，不等式 (6) を示せ．

3.2　共役勾配法

問題 9 (共役勾配法)**.**

次の係数およびベクトルを

$$A = \begin{bmatrix} 5 & -2 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 5 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 5 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 5 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 5 & -2 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & -1 & 5 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

とする．これらを用いた連立一次方程式 $Ax = b$ を考える．

(1) Gauss の消去法を用いて，解 x_* を求めよ．

(2) 共役勾配法を用いると，原理的には 6 ステップで解が求められる．初期値を零ベクトルとし，1 ステップから 6 ステップまでの解を示せ．(ヒント : 共役勾配法が使えるように，適当な方法を用いて正定値行列を係数行列として持つ問題に変換して考えるとよい)

3.3　非正則な連立一次方程式

逐次最小化法では，非正則な行列 A に対しても解を求められるが，初期値に応じて解は異なる．

問題 10 (非正則な連立一次方程式)**.**

次の係数行列およびベクトルを考える．

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 \end{bmatrix},\ b = 1$$

これらを用いた連立一次方程式 $Ax = b$ の解 x を求めたい．次の二次関数を最小化することを考え，解を求めよう．

$$S(x) := (Ax - b)^\top (Ax - b)$$

ただし，$x \in \mathbb{R}^2$ は一意には求まらない．

(1) 初期値を $x^{(0)} = [1,\ 1]^\top$ として，最急降下法を用いて解を求める．$a_1 = 3, a_2 = 1$ のとき，$x^{(3)}$ を求めよ．

(2) 目的関数 $S(x)$ に対し，$\epsilon\|x\|^2$ を加えた次の目的関数を考える．

$$S_1(x) := \frac{1}{2}(Ax - b)^\top (Ax - b) + \epsilon\|x\|_2^2$$

ただし，$\epsilon > 0$，$\|\bullet\|_2$ は Euclid ノルムとする．このとき，S_1 を最小にする $x \in \mathbb{R}^2$ を求めよ．

(3) $Ax = b$ の制約条件下で，$\frac{1}{2}\|x\|^2$ を最小化する問題を考える．この解を得るには，Lagrange の未定乗数法より，

$$S_2(x, \lambda) := \lambda(Ax - b) + \frac{1}{2}\|x\|_2^2$$

の極値を求めればよい．ただし，$\lambda \in \mathbb{R}$ は Lagrange 未定乗数である．このとき，最適解を求めよ．

非正則な連立一次方程式を考える場合，逐次最小化法は何かしらの解を与えてくれる．非正則な連立一次方程式は，最適化問題の拘束条件として現れる場合もある．その場合は，上に挙げたような Lagrange の未定乗数法を用いるなど，線形拘束条件における最適化問題の解法を利用すればよい．

4　Newton 法

関数 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ に対し，

$$f(x) = 0$$

を解くことを考える．Newton 法では，これを反復法を用いて求める．

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - (f'(x^{(k)}))^{-1} f(x^{(k)}) \tag{7}$$

問題 11 (1 次元非線形方程式)**.**

$f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ とする．次の方程式を，Newton 法を用いて解け．ただし，$x^{(0)} = 0$ とし，初期値をステップ 0 として反復回数は 10 回，結果は 10 進 3 桁の浮動小数点表示で表すこと（計算の各ステップで 10 進 3 桁の浮動小数点数に直さなくてもよい）．

(1) $f(x) = (x - 1)^2 - 3$.

(2) $f(x) = x^5 + 2x^4 + 3x^3 + 4x^2 + 5x^1 + 6$.

数理最適化問題のように, 調整可能な n 個の変数 $x \in \mathbb{R}^n$ に対して何らかのコスト関数 $S : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ を最大または最小にしたい場合は多々ある．次の問題は，統計学などの推定問題で非常によく用いられる，最尤推定に関係する問題である．

問題 12 (連立非線形方程式)**.**

関数 $S : \mathbb{R}^6 \to \mathbb{R}$ を，

$$S(x) = \exp(-x^\top Ax + 2x^\top b + b^\top b)$$

とし，この関数を最大化する x を求めよう．ここで，

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 2 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 2 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 2 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} -2 \\ 2 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \\ 3 \end{bmatrix}$$

とする．このとき，以下の問に答えよ．

(1) $f(x) := \frac{\partial}{\partial x} S(x)$ を求めよ．

(2) $f(x) = 0$ の解を，Newton 法を用いて求めよ．

5　非線形方程式の縮小写像の不動点定理

Newton 法は縮小写像の一種であり,

$$x^{(k+1)} = \phi(x^{(k)}) := x^{(k)} - (f'(x^{(k)}))^{-1} f(x^{(k)})$$

である．

問題 13 (1 次元非線形方程式)**.**

$f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ とする．次の方程式を，Newton 法を用いて解くものとする．

(1) $f(x) = (x-2)^2 - 4 = 0$ の解は，$x = 2 \pm 2$ である．このとき，ϕ が縮小写像となる領域（区間）K_+ と K_- を 2 つ示し，それぞれの領域で得られる解を示せ．

(2) $f(x) = 3x^3 + 10x^2 - 2x + 1$ とし，$f(x) = 0$ となる実数解を求めたい．このとき，ϕ が縮小写像となる領域 K を示し，領域 K の一点を初期値に選んで Newton 法を走らせ，10 ステップ後に得られる解を求めよ．（ヒント：関数を図示すると，縮小写像となる $f(x) = 0$ の零点および領域の見当がつきやすい）

6　Sturm の方法

代数方程式の根の数を数える問題に，Sturm の方法と呼ばれる数値計算法がある．

問題 14 (Sturm の方法)**.**

次の多項式を考える．

$$f(x) = x^5 - \frac{1079}{10}x^4 + \frac{3926}{5}x^3 + \frac{2558}{5}x^2 - \frac{15784}{5}x - 320$$

(1) Sturm 列を求めよ.
(2) 閉区間 $[-1, 5]$ の中にある $f(x) = 0$ の解の個数を，Sturm の定理から答えよ.
(3) 閉区間 $[-1, 5]$ の中にある $f(x) = 0$ の全ての解を，適当な初期値を選び，Newton 法を用いて求めよ．得られた解に対し，用いた初期値をそれぞれ明記すること．（ヒント：初期値の選び方は，まず $f(x)$ のグラフを描いてみて見当をつけるとよい）

この問題は，講義が間に合わなかった場合は一律に加点する.

7　期末試験問題の作成

今年度も，期末試験問題の一部を学生から募集する予定である．各レポートで出題し，作成例の最も多い分野から出題する.

問題 15 (問題作成)**.** 今回のレポートの範囲で，自分が教員の立場として期末試験に出したい問題，およびその解答例を作成せよ．計算問題でなくてもよい．その際，次の点に注意せよ.

- 20 分以内に解ける問題にすること.
- 計算が必要な場合，手計算で行える問題にすること.
- 自分が重要であると思う問題にすること.
- 法律や道徳に触れない問題にすること．（個人名が出てくる問題，誹謗・中傷するような問題，著作権（copy right マーク）のついている本に載っている問題をそのまま用いる，など）

また，作成した問題の意図も述べること．例えば，基本的な知識である，教養として知っておくべきである，地頭の良さを見ることができる，など.

なお，この問題は，問題，解答例と作成意図が書いてあれば，どのような問題でも満点とする．また，試験に採用する場合は，一部を変更して出題する．作成した問題の一部は，個人名を伏せて，演習問題などに利用させてもらうかもしれないので，その点は了承されたい.