数値計算 期末試験問題

対象：計算機科学コース・ソフトウェア科学コース・数理科学コース

担当教員：大木 健太郎

2013 年 8 月 1 日 (木曜日 5 時限)

教科書・ノート・電卓等の持ち込みは一切不可
携帯電話などの携帯端末機器の使用は不可（時計としての使用も禁止する）

1. 区間 $[-1,1]$ において，次の関数を最大にする $x = x^* \in [-1,1]$ を求めたい．

$$S(x) = -x^3 - 2x^2 + x - 1$$

   (a) $p(x) = \frac{dS(x)}{dx}$ が $[-1,1]$ の間に根を 1 つ持つことを，Sturm の定理を用いて示せ．

   (b) $[-1,1]$ の間で $p(x) = 0$ の解を求めたい．10 進 3 桁の浮動小数点数表示の計算機を用いることを想定し，初期値を $x^{(0)} = 0$ として，Newton 法を 2 回反復した値 $x^{(2)}$ を求めよ．

2. 次の実対称行列 $A \in \mathbb{R}^{3\times 3}$ の固有値問題を考える．

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

また，次の行列を定義する：$\theta_i \in [0, 2\pi)$，$(i = 1,2,3)$ を用いて

$$P_1(\theta_1) = \begin{bmatrix} \cos(\theta_1) & \sin(\theta_1) & 0 \\ -\sin(\theta_1) & \cos(\theta_1) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},\ P_2(\theta_2) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\theta_2) & \sin(\theta_2) \\ 0 & -\sin(\theta_2) & \cos(\theta_2) \end{bmatrix},$$

$$P_3(\theta_3) = \begin{bmatrix} \cos(\theta_3) & 0 & \sin(\theta_3) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\theta_3) & 0 & \cos(\theta_3) \end{bmatrix}$$

   (a) Jacobi 法とは，各ステップで適切に選んだ P_i，θ_i によって非対角要素を消去し，$A^{(k)} = P_i(\theta_i)^\top A^{(k-1)} P_i(\theta_i)$，$(A^{(0)} = A)$ を対角行列に収束させる方法である．$A^{(k)}$ が対角行列に漸近的に収束することを示せ．

   (b) Jacobi 法は，消去する非対角成分の選び方によって，収束速度が異なる．最も早く対角行列に収束する方法を用いて，1 ステップだけ Jacobi 法を計算せよ．数値計算による誤差は考えなくともよく，平方根や分数もそのまま表記してよい．

3. 次の行列を考える．

$$X = \begin{bmatrix} 1 & \epsilon \\ 0 & -6 \\ 0 & 8 \end{bmatrix}$$

ただし，ϵ は $0 < \epsilon \ll 1$ を満たす微小な数とする．この行列の特異値は，$X^\top X$ の固有値の平方根を計算すれば求められるが，ここでは次の手順で X の最大特異値を求めたい．

(a) 基本直交行列 $Q \in \mathbb{R}^{3\times 3}$ を用いて，上二重対角行列 B を求めよ．

$$QX = \begin{bmatrix} * & * \\ 0 & * \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B \\ 0_{1\times 2} \end{bmatrix}$$

ただし，$0_{n,m}$ は n 行 m 列のゼロ行列を表す．

(b) 行列 $B^\top B$ の最大固有値を，初期ベクトルを

$$x^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

として，べき乗法を用いて求めたい．$x^{(k)} = B^\top B x^{(k-1)}$ を $k = 2$ まで計算し，得られたベクトルから行列 $B^\top B$ の最大固有値の近似値を求めることで，X の最大特異値の近似値を求めよ．ただし，$\epsilon = 0.1$ とし，計算の簡単のために小数点第2位以下の数値は切り捨ててよい．また，$k = 2$ までの計算で，得られた最大特異値の近似値が妥当であるかどうかも述べよ．

4. 連立一次方程式

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

を解くには，A が正則行列であれば厳密解 $x = A^{-1}b$ が存在する．しかし，数値計算では丸め誤差などの影響で，解が厳密解と大きく異なってしまう場合がある．そのような数値計算問題を具体的に1つ考えよ．また，考えた問題の解の精度が悪くなる理由を述べよ．

配点と採点時の注意

- 配点：
  - 1 (a) 15 点，　1 (b) 15 点，
  - 2 (a) 15 点，　2 (b) 15 点，
  - 3 (a) 15 点，　3 (b) 15 点，
  - 4　　10 点
- 計算過程から明らかに計算ミス，あるいは書き間違いと分かるは，減点しない．

得点率

試験を受けた人（70 名）の平均点は，50.83 点で，各問題の得点率は表 1 の通り．満点は 2 人．試験の結果のヒストグラムは，図 1 の通り（未受験者 19 名も 0 点としてカウント）．試験のみで合格点に達した学生は，29 名（約 41%）．

表 1: 各問題の得点率（10 進数 2 桁）と配点

問題	問 1(a)	問 1(b)	問 2(a)	問 2(b)	問 3(a)	問 3(b)	問 4
得点率	0.92	0.90	0.35	0.43	0.23	0.14	0.59
配点	15	15	15	15	15	15	10

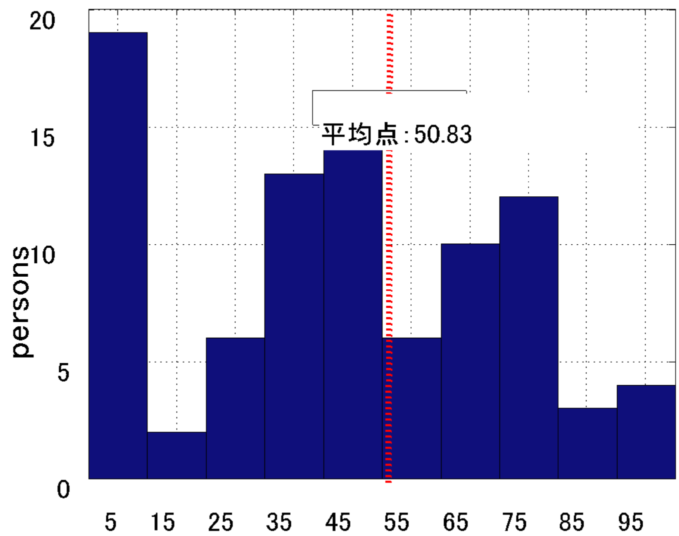

図 1: 試験の得点の分布．

解答例

誤植訂正（8 月 5 日）

1. (a) $p(x) = -3x^2 - 4x + 1$ であり，Sturm 列は $p_2(x) = p(x)$，1 回微分して $p_1(x) = -6x - 4$，さらに $p_2(x)$ を $p_1(x)$ で割った余りにマイナスをかけた $p_0(x) = -7/3$ である．$[-1, 1]$ の間に根が何個あるかを調べるには，端点での $(p_2(x), p_1(x), p_0(x))$ の，符号変化回数 $N(x)$ の差を調べればよい．

$$(p_2(-1), p_1(-1), p_0(-1)) = \left(2,\ 2,\ -\frac{7}{3}\right) \quad \Rightarrow \quad N(-1) = 1 \tag{1}$$

$$(p_2(1), p_1(1), p_0(1)) = \left(-6,\ -10,\ -\frac{7}{3}\right) \quad \Rightarrow \quad N(1) = 0 \tag{2}$$

より，区間 $[-1, 1]$ の中の根の数は $N(-1) - N(1) = 1$ 個.

(b) $p(x) = 0$ の周りで展開すると，

$$0 = p(x) \simeq p(x^{(k)}) + \left.\frac{dp(x)}{dx}\right|_{x=x^{(k)}} (x - x^{(k)}) \tag{3}$$

となり，$\simeq$ を $=$ で，x を $x^{(k+1)}$ で置き換えたものが Newton 法である；

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{p(x^{(k)})}{p'(x^{(k)})}. \tag{4}$$

これに $x^{(0)} = 0$ を代入すると，

$$x^{(1)} = 0 - \frac{p(0)}{p'(0)} = -\frac{1}{-4} = 0.25 \tag{5}$$

を得る．次のステップを計算するために，得られた値を代入すると，10 進 3 桁の浮動小数点数表示に気をつけて，

$$\begin{aligned} x^{(2)} = 0.25 - \frac{p(0.25)}{p'(0.25)} = 0.25 - \frac{-3/16}{-5.5} &\simeq 0.25 - \frac{0.188}{5.5} \\ &\simeq 0.25 - 0.0342 \simeq 0.216 \end{aligned} \tag{6}$$

を得る．厳密解とその 10 進 3 桁の浮動小数点数表示では,

$$x = \frac{-2 + \sqrt{7}}{3} \simeq 0.215 \tag{7}$$

であるので，非常に近い値が得られている．

2. (a) 直交行列 P は，次の性質を満たす.

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}[A^\top A] &= \sum_{i,j=1}^{3} |A_{ij}|^2 \\ &= \mathrm{Tr}[PA^\top P^\top PAP^\top] = \sum_{i,j=1}^{3} |A_{ij}^{(1)}|^2 \end{aligned} \tag{8}$$

つまり，要素の絶対二乗和が保存される．したがって，直交行列によって対角成分の二乗和が増えるならば，非対角成分の二乗和は必然的に減少する．そこで，与えられた行列 $P_1(\theta_1)$，$P_2(\theta_2)$，$P_3(\theta_3)$ によって対角成分が増加することを示せばよい．Jacobi 法を用いる場合，対角和の計算するためには，実質的に 2×2 の部分行列を計算すればよい．そこで $\alpha,\beta,\gamma\in\mathbb{R}$ とし，$\delta := (\alpha-\gamma)/2$ とすると，

$$\begin{aligned}&\begin{bmatrix}\cos(\theta) & -\sin(\theta)\\ \sin(\theta) & \cos(\theta)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha & \beta\\ \beta & \gamma\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\cos(\theta) & \sin(\theta)\\ -\sin(\theta) & \cos(\theta)\end{bmatrix}\\ =&\frac{\alpha+\gamma}{2}I+\begin{bmatrix}\cos(\theta) & -\sin(\theta)\\ \sin(\theta) & \cos(\theta)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\delta & \beta\\ \beta & -\delta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\cos(\theta) & \sin(\theta)\\ -\sin(\theta) & \cos(\theta)\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{9}$$

より，第二項のみに注目すればよい．$a=\cos(\theta)$，$b=\sin(\theta)$ とすれば

$$\begin{aligned}&\begin{bmatrix}a & -b\\ b & a\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\delta & \beta\\ \beta & -\delta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a & b\\ -b & a\end{bmatrix}\\ =&\begin{bmatrix}\delta(a^2-b^2)-2\beta ab & \beta(a^2-b^2)+2\delta ab\\ \beta(a^2-b^2)+2\delta ab & -\delta(a^2-b^2)+2\beta ab\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{10}$$

より，

$$a^2-b^2=\frac{\delta}{\sqrt{\beta^2+\delta^2}},\quad 2ab=-\frac{\beta}{\sqrt{\beta^2+\delta^2}} \tag{11}$$

とおけば,

$$\begin{aligned}&\begin{bmatrix}\cos(\theta) & -\sin(\theta)\\ \sin(\theta) & \cos(\theta)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha & \beta\\ \beta & \gamma\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\cos(\theta) & \sin(\theta)\\ -\sin(\theta) & \cos(\theta)\end{bmatrix}\\ =&\frac{\alpha+\gamma}{2}I+\sqrt{\beta^2+\delta^2}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{12}$$

この対角成分の二乗和を計算すると，

$$\frac{(a+\gamma)^2}{2}+2\beta^2+2\delta^2=\underbrace{\frac{(\alpha+\gamma)^2+(\alpha-\gamma)^2}{2}}_{=\alpha^2+\gamma^2}+2\beta^2\geq\alpha^2+\gamma^2 \tag{13}$$

である．したがって，非対角成分 β が非ゼロであるならば，対角成分の二乗和は厳密に増加する．よって，非ゼロの非対角成分を選んで消去すれば，常に非対角成分の二乗和が厳密に減少するため，Jacobi 法によって $A^{(k)}$ は対角行列に漸近的に収束する．

(補足)　Jacobi 法を用いれば非対角成分を消去できることを用いて，途中の計算を省けば,

$$\begin{bmatrix}\cos(\theta) & -\sin(\theta)\\ \sin(\theta) & \cos(\theta)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha & \beta\\ \beta & \gamma\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\cos(\theta) & \sin(\theta)\\ -\sin(\theta) & \cos(\theta)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\alpha' & 0\\ 0 & \gamma'\end{bmatrix} \tag{14}$$

とし，式 (8) を用いると，

$$(\alpha')^2+(\gamma')^2=\alpha^2+\gamma^2+2\beta^2 \tag{15}$$

より，$\beta\neq 0$ ならば対角和は厳密に増加する．これは非対角成分の二乗和が厳密に減少することを意味し，これを繰り返すことで $A^{(k)}$ は対角行列に漸近的に収束する．

(b) 非対角要素のうち，絶対値の最も大きな要素を消去し続ければ，早く収束する．行列 A の非対角要素のうち，最も大きなものは3である．したがって，P_2 を用いて非対角成分を消去すればよい．消去したい部分と関連する 2×2 行列部分を取り出し，$a=\cos(\theta_2)$，$b=\sin(\theta_2)$ としてを求めよう．

$$\begin{aligned}&\begin{bmatrix} a & -b \\ b & a \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -1 & 3 \\ 3 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a & b \\ -b & a \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} -a-3b & 3a-b \\ -b+3a & 3b+a \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a & b \\ -b & a \end{bmatrix}\\ &=\begin{bmatrix} -a^2+b^2-6ab & -3b^2+3a^2-2ab \\ -3b^2+3a^2-2ab & a^2-b^2+6ab \end{bmatrix}\end{aligned}\tag{16}$$

であり，非対角成分は倍角の公式を用いて

$$3\cos(2\theta_2)=\sin(2\theta_2)\tag{17}$$

を満たせばよいことが分かる．よって，次を考えればよい．

$$\cos(2\theta_2)=\frac{1}{\sqrt{10}},\quad \sin(2\theta_2)=\frac{3}{\sqrt{10}}\tag{18}$$

この θ_2 は鋭角で，90度を越えないため，$\cos(\theta_2)$ と $\sin(\theta_2)$ は

$$\cos(\theta_2)=\frac{1}{2}\left(1+\frac{1}{\sqrt{10}}\right),\quad \sin(\theta_2)=\frac{1}{2}\left(1-\frac{1}{\sqrt{10}}\right)\tag{19}$$

と置けばよい．この θ_2 を用いて，Jacobi法を1ステップ計算すると，

$$\begin{aligned}A^{(1)}=&P_2^\top(\theta_2)AP_2(\theta_2)\\ =&\begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2}\left(3-\frac{1}{\sqrt{10}}\right) & -\frac{1}{2}\left(1-\frac{3}{\sqrt{10}}\right) \\ \frac{1}{2}\left(3-\frac{1}{\sqrt{10}}\right) & -\frac{1+3\sqrt{3}}{\sqrt{10}} & 0 \\ -\frac{1}{2}\left(1-\frac{3}{\sqrt{10}}\right) & 0 & \frac{1+3\sqrt{3}}{\sqrt{10}} \end{bmatrix}\end{aligned}\tag{20}$$

ここで $a^2-b^2=\cos(2\theta_2)$，$2ab=\sin(2\theta_2)$ を用いた．

3. (a)

$$B=\begin{bmatrix} 1 & \epsilon \\ 0 & 10 \end{bmatrix}\tag{21}$$

ただし，

$$Q=I-2uu^\top,\ u=\frac{x-y}{\|x-y\|_2},\tag{22}$$

$$x=\begin{bmatrix} \epsilon & -6 & 8 \end{bmatrix}^\top,\quad y=\begin{bmatrix} \epsilon & 10 & 0 \end{bmatrix}^\top\tag{23}$$

(b)

$$B^\top B=\begin{bmatrix} 1+\epsilon^2 & \epsilon \\ \epsilon & 100 \end{bmatrix}\simeq\begin{bmatrix} 1 & \epsilon \\ \epsilon & 100 \end{bmatrix}\tag{24}$$

より，

$$x^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & 0.1 \end{bmatrix}^\top, \; x^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 & 10.1 \end{bmatrix}^\top \tag{25}$$

である．ここで

$$\lambda = \frac{\langle x^{(2)}, x^{(2)} \rangle}{\langle x^{(2)}, x^{(1)} \rangle} = \frac{103.01}{2.01} \simeq \frac{103}{2} \simeq 51.5 \tag{26}$$

この平方根が X の最大特異値である．

問題では X の最大特異値を求めることを要求したが，特異値の二乗がべき乗法で得られていればよしとする．

$X^\top X$ の固有値は，

$$\begin{aligned} \det\left(\lambda I - X^\top X\right) =& (\lambda - 1)(\lambda - 100 - \epsilon^2) - \epsilon^2 \\ =& \lambda^2 - (101 + \epsilon^2)\lambda + 100 = 0 \end{aligned} \tag{27}$$

より，ϵ^2 を無視すると，最大固有値は 100 である．したがって，先ほど得られた 51.5 は近似値として妥当ではない．

（補足）　もう 1 ステップ計算すると，近似値として妥当な値が得られる．これは最初に設定したベクトル $x^{(0)}$ が悪いからである．この問題は，ほんの少しだけ行列が変化してしまうと，絶対値の意味で 2 番目に大きな固有値に対し，べき乗法は正しい値を返さないことの例である．

4. 例えば

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0.001 \end{bmatrix} \tag{28}$$

とすると，行列 A の条件数が非常に悪くなり，丸め誤差の影響で数値計算の解が悪くなる．$x = (x_1 \; x_2)^\top$ とすると，厳密解は

$$x_1 = b_1, \quad x_2 = 1000(b_2 - b_1) \tag{29}$$

となり，$b_2 - b_1 = \epsilon$ が非常に小さく，丸め誤差と同じくらいの大きさの値の場合，まったく正しくない値が返ってくる可能性がある．