数値計算 参考問題（訂正 & 解答例付き）

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

2014 年 7 月 17 日 (木曜日 5 時限)

試験本番での注意（予定）

- 電卓および電卓機能を有する携帯電話の持ち込み可（PC やタブレット端末等は不可）.
- 教科書・ノート等の持ち込みは一切不可.
- 電卓機能以外の携帯端末等の利用は不可（とくにネットワーク機能は不可）.
- 試験中であっても教員が許可しないものは使用不可とし，試験終了時刻まで没収する.
- その他，私語など通常の試験で禁止されていることは禁止.

1. 以下を 10 進 3 桁の浮動小数点数で計算し，Newton 法で求めたい．各問題の初期値を $x^{(0)} = 3$ として，2 ステップ後の更新値 $x^{(2)}$ を答えよ.
   (a) $\sqrt{17}$.
   (b) $7 - \sqrt{2}$.
   (c) $2^{1/3}$.

2. 区間 $[0, 2]$ において，次の関数を最大にする $x = x^* \in [0, 2]$ を求めたい.

$$f(x) = x \exp(-x + 1)$$

この問題は解析的に解を求められ，$x^* = 1$ となる．これを数値計算により求める．とくに指示しない限りは途中計算を浮動小数点数で表して計算する必要はないが，答えは 10 進 3 桁の浮動小数点数表示で答えよ.

(a) 関数 f をそのまま扱うのは数値計算的に難しいので，多項式近似する．二乗ノルムの意味で最適近似となる 2 次多項式 $g(x) = ax^2 + bx + c$ の係数を求めたい.

$$\int_0^2 (f(x) - g(x))^2 dx = \int_0^2 (f(x) - \theta^\top \varphi(x))^2 dx,$$
$$\varphi(x) = \begin{bmatrix} x^2 & x & 1 \end{bmatrix}^\top,\ \theta = \begin{bmatrix} a & b & c \end{bmatrix}^\top$$

の解は，

$$Q\theta = \Phi, \quad Q \in \mathbb{R}^{3\times 3},\ \Phi \in \mathbb{R}^3$$

の形の連立一次方程式を解くことに帰着される．これを示し，Q と Φ を求めよ.

(b) 連立一次方程式

$$Q\theta_* = \Phi,$$

の解を共役勾配法で求めよ．$\theta^{(0)} = (0,0,0)^\top$ とする．計算過程は数値誤差を考えなくてもよいが，最後は10進3桁の浮動小数点数表示で表せ．

(c) 得られた多項式を微分し，微分がゼロとなる最大となる x を求めよ．また，厳密解と比較し，近似の良さについて議論せよ．
（Horner 法を電卓で扱うのは時間がかかりすぎるので，止めます）

(d) $g(x)$ を次のように分解する．

$$g(x) = \bar{\theta}^\top \bar{\varphi}(x), \quad \bar{\varphi}(x) = \begin{bmatrix} 3x^2 - 6x + 2 \\ x - 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \ \bar{\theta} = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{bmatrix}$$

このとき，

$$\int_0^2 \bar{\varphi}(x)\bar{\varphi}(x)^\top dx$$

は対角行列になることを確認せよ．また，このメリットは何か？

3. ベクトル空間 $\mathbb{R}^3$ で数値計算することを考え，ユークリッドノルム $\|\bullet\|_2$ で計算精度を評価されるとする．このとき，次の行列 $A \in \mathbb{R}^{3\times 3}$ の条件数を，次の手順で求めよ．

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 5 & 7 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

(a) ２つの連立一次方程式

$$Ax_i = b_i, \quad i = 1, 2, \ b_1 \neq \begin{bmatrix} 0, & 0, & 0 \end{bmatrix}^\top$$

より，

$$\frac{\|x_1 - x_2\|_2}{\|x_1\|_2} \leq \kappa(A) \frac{\|b_1 - b_2\|_2}{\|b_1\|_2} \tag{1}$$

が成り立つことを示せ．ただし，$\kappa(A) = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2$ であり，行列に対してのノルムは誘導ノルムである．

(b) A の逆行列 A^{-1} を

$$Ax_i = b_i, \quad b_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \ b_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \ b_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

を解くことで求めよ．

(c) べき乗法を用いて，$A^\top A$ の最大固有値を求めよ．反復に用いるベクトルの初期値を $x^{(0)} = (1,0,0)^\top$ とし，3ステップ後までの結果から求めよ．

(d) べき乗法を用いて，$A^{-\top}A^{-1}$ の最大固有値を求めよ．反復に用いるベクトルの初期値を $x^{(0)} = (1,0,0)^\top$ とし，3 ステップ後までの結果から求めよ．

(e) 条件数を求め，得られた条件数から連立一次方程式 $Ax = b$ の解き易さについて論ぜよ．

4. 次の行列の最大特異値を求めよ．数値計算的に求める場合は，アルゴリズムも明記すること．

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 1 \\ -1 & 1 & 0 & -1 \\ 2 & 3 & -3 & 1 \end{bmatrix} \tag{2}$$

5. 次の中から 1 つ選び，回答せよ．

(a) 反復法の収束を解析的に評価するには，縮小写像の原理を用いることが一般的である．縮小写像の原理について述べよ．

(b) 代数連立方程式における DKA 法について述べよ．

(c) n 次元実対称行列を 3 重対角化するアルゴリズムを 1 つ挙げ，その原理を説明せよ．

解答例

1. Newton 法とは, $f(x)=0$ の解を，次の反復アルゴリズムによって解く手法である．

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

(a) $x=\sqrt{17} \simeq \sqrt{4.12}$ は，$f(x)=x^2-17=0$ の解である．$f'(x)=2x$ より，

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{(x^{(k)})^2-17}{2x^{(k)}}$$

を反復すればよい．$x^{(0)}=3$ より，

$$\frac{f(x^{(0)})}{f'(x^{(0)})} = \frac{-8}{6} \simeq -1.33$$

であり，したがって 1 ステップ後の更新値は

$$x^{(1)} = 4.33$$

となる．$(x^{(1)})^2 \simeq 18.7$ より，

$$\frac{f(x^{(1)})}{f'(x^{(1)})} = \frac{1.7}{8.66} \simeq 0.196$$

であり，2 ステップ後の更新値は

$$x^{(2)} \simeq 4.33 - 0.20 = 4.13$$

となる．回答は，上のままでも，$x^{(2)} = +.413 \times 10^1$ と書いてもよい. (以下同様)

(b) $x = 7-\sqrt(2) \simeq 5.59$ は，$f(x)=x^2-14x+47=0$ の解，あるいは $g(y)=y^2-2=0$ の解に 7 を加えたものである．

$f(x)=0$ **の場合** $f'(x)=2x-14$ より，

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{(x^{(k)})^2-14x^{(k)}+47}{2x^{(k)}-14}$$

を反復すればよい.

$$\frac{f(x^{(0)})}{f'(x^{(0)})} = \frac{9-42+47}{9.5-14} = -1.75$$

であり，1 ステップ後の更新値は

$$x^{(1)} = 3 + 1.75 = 4.75$$

となる．次に，2 ステップ後の値を計算する．$(x^{(1)})^2 \simeq 22.6$ であるので，

$$\frac{f(x^{(1)})}{f'(x^{(1)})} \simeq \frac{22.6-66.5+47}{-8} = \frac{3.1}{-4.5} \simeq -0.689$$

したがって，

$$x^{(2)} \simeq 4.75 + 0.689 \simeq 4.75 + 0.69 = 5.44$$

を得る.

$g(y)=0$ の場合 こちらの解法で行う場合，試験では Newton 法の初期値として $y^{(0)}=3$ を仮定してもよい．

$$y^{(k+1)} = y^{(k)} - \frac{(y^{(k)})^2-2}{2y^{(k)}}$$

を反復すればよい．$y^{(0)}=3$ より，

$$\frac{f(y^{(0)})}{f'(y^{(0)})} = \frac{7}{6} \simeq 1.17$$

であり，したがって 1 ステップ後の更新値は

$$y^{(1)} = 1.83$$

となる．$(x^{(1)})^2 \simeq 3.36$ より，

$$\frac{f(y^{(1)})}{f'(y^{(1)})} = \frac{1.36}{3.67} \simeq 0.371$$

であり，2 ステップ後の更新値は

$$y^{(2)} \simeq 1.83 - 0.37 = 1.46$$

となる．よって，$x \simeq 7 - y^{(2)} = 5.54$.

(c) $x = 2^{1/3} \simeq 1.23$ は，$f(x) = x^3 - 2 = 0$ の解である．このとき，Newton 法のアルゴリズムは,

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{(x^{(k)})^3-2}{3(x^{(k)})^2}$$

となる．

$$\frac{f(x^{(0)})}{f'(x^{(0)})} = \frac{27-2}{27} \simeq 0.926$$

であり，1 ステップ後の更新値は

$$x^{(1)} \simeq 3 - 0.926 \simeq 3 - 0.93 = 2.07$$

となる．次に，2 ステップ後の値を計算する．$(x^{(1)})^2 \simeq 4.28$，$(x^{(1)})^3 \simeq 8.86$ であるので,

$$\frac{f(x^{(1)})}{f'(x^{(1)})} \simeq \frac{8.86-2}{2\times 4.28} = \frac{6.86}{8.56} \simeq 0.801$$

となる．したがって,

$$x^{(2)} \simeq 2.07 - 0.801 \simeq 2.07 - 0.80 = 1.27$$

となる．

2. $f(x)$ は唯一の極値を持つ関数であり，1 階微分を計算すれば，$x=1$ で最大値を取ることが示せる．ここではそれを数値的に扱う．

(a)

$$
\begin{aligned}
&\int_0^2 \left(f(x)-\theta^\top \varphi(x)\right)^2 dx \\
&=\int_0^2 f(x)^2 dx - 2\underbrace{\int_0^2 f(x)\varphi(x)^\top dx}_{=:\Phi^\top}\,\theta + \theta^\top \underbrace{\int_0^2 \varphi(x)\varphi(x)^\top dx}_{=:Q}\,\theta \\
&=\int_0^2 f(x)^2 dx - 2\Phi^\top\theta + \theta^\top Q\theta
\end{aligned} \tag{3}
$$

を得る．ここで

$$
\begin{aligned}
\Phi &= \begin{bmatrix} \int_0^2 x^2(xe^{-x+1})dx \\ \int_0^2 x(xe^{-x+1})dx \\ \int_0^2 xe^{-x+1}dx \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 2e-16e^{-1}+(-15e^{-1}+3e)+(-6e^{-1})+e-e^{-1} \\ e-5e^{-1}-4e^{-1}+e-e^{-1} \\ -2e^{-1}+e-e^{-1} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 6e-38e^{-1} \\ 2e-10e^{-1} \\ e-3e^{-1} \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

であり，

$$
\begin{aligned}
Q &= \begin{bmatrix} \int_0^2 x^4dx & \int_0^2 x^3dx & \int_0^2 x^2dx \\ \int_0^2 x^3dx & \int_0^2 x^2dx & \int_0^2 xdx \\ \int_0^2 x^2dx & \int_0^2 xdx & \int_0^2 dx \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \frac{2^5}{5} & \frac{2^4}{4} & \frac{2^3}{3} \\ \frac{2^4}{4} & \frac{2^3}{3} & \frac{2^2}{2} \\ \frac{2^3}{3} & \frac{2^2}{2} & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{32}{5} & 4 & \frac{8}{3} \\ 4 & \frac{8}{3} & 2 \\ \frac{8}{3} & 2 & 2 \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

を得る．Q は $\varphi(x)\varphi(x)^\top \geq 0$ の積分であるので，Q も半正定値対称行列であり，$\det(Q)\neq 0$ であるので，正定値行列になる．式 (3) を θ に関して平方完成すると，

$$
\left(Q\theta-\Phi\right)^\top Q^{-1}\left(Q\theta-\Phi\right) + \int_0^2 f(x)^2dx - \Phi^\top Q^{-1}\Phi
$$

となるので，二乗ノルムを最小にするパラメータ θ は，

$$
Q\theta - \Phi = 0
$$

の解である．

(b) 連立一次方程式 $Ax=b$ を解くアルゴリズムの 1 つである共役勾配法は，次のア

ルゴリズムである．

$$
\begin{aligned}
p^{(0)} :=& r^{(0)} = b - Ax^{(0)},\\
x^{(k+1)} =& x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)},\\
r^{(k+1)} =& r^{(k)} - \alpha_k A p^{(k)},\\
p^{(k+1)} =& r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)},\\
\alpha_k =& \frac{(r^{(k)})^\top r^{(k)}}{(p^{(k)})^\top A p^{(k)}},\ \beta_k = \frac{(r^{(k+1)})^\top r^{(k+1)}}{(r^{(k)})^\top r^{(k)}},\ k = 0, 1, 2
\end{aligned}
$$

$b = \Phi$，$A = Q$ を代入し，

$$
p^{(0)} = r^{(0)} = \begin{bmatrix} 6e - 38e^{-1} \\ 2e - 10e^{-1} \\ e - 3e^{-1} \end{bmatrix}
$$

を得る．このままでは計算しにくいので，10 進 3 桁の浮動小数点数表示で扱う．ネイピア数を有限で打ち切ったほうが計算しやすいので，

$$
e^{\pm 1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\pm 1)}{n!}
$$

を用いると，10 進 3 桁の浮動小数点数表示では，

$$
e^{\pm 1} \simeq 1 \pm 1 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{3!} + \frac{1}{4!} \pm \frac{1}{5!} = \begin{cases} 2.72, & + \\ 0.367, & - \end{cases}
$$

となるので，

$$
p^{(0)} = r^{(0)} = \Phi \simeq \begin{bmatrix} 16.3 - 13.9 \\ 5.44 - 3.67 \\ 2.72 - 1.10 \end{bmatrix} \simeq \begin{bmatrix} 2.4 \\ 1.77 \\ 1.62 \end{bmatrix}
$$

である．各ステップ毎に計算しよう．

i.

$$
\alpha_0 = \frac{(r^{(0)})^\top r^{(0)}}{(p^{(0)})^\top A p^{(0)}} \simeq 9.87 \times 10^{-2}
$$

より，

$$
\begin{aligned}
x^{(1)} =& x^{(0)} + \alpha_0 p^{(0)} \simeq \begin{bmatrix} 0.237 \\ 0.175 \\ 0.160 \end{bmatrix},\\
r^{(1)} =& r^{(0)} - \alpha_0 A p^{(0)} \simeq \begin{bmatrix} -0.242 \\ 0.0363 \\ 0.318 \end{bmatrix},\\
\beta_0 =& \frac{(r^{(1)})^\top r^{(1)}}{(r^{(0)})^\top r^{(0)}} \simeq 0.0140,\\
p^{(1)} =& r^{(1)} + \beta_0 p^{(0)} \simeq \begin{bmatrix} -0.208 \\ 0.0610 \\ 0.341 \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

ii.

$$\alpha_1 = \frac{(r^{(1)})^\top r^{(1)}}{(p^{(1)})^\top A p^{(1)}} \simeq 1.32$$

より，

$$\begin{aligned} x^{(2)} =& x^{(1)} + \alpha_1 p^{(1)} \simeq \begin{bmatrix} -0.0370 \\ 0.255 \\ 0.609 \end{bmatrix}, \\ r^{(2)} =& r^{(1)} - \alpha_1 A p^{(1)} \simeq \begin{bmatrix} -0.00895 \\ 0.0193 \\ 0.00904 \end{bmatrix}, \\ \beta_1 =& \frac{(r^{(2)})^\top r^{(2)}}{(r^{(1)})^\top r^{(1)}} \simeq 0.00333, \\ p^{(2)} =& r^{(2)} + \beta_1 p^{(1)} \simeq \begin{bmatrix} -0.00964 \\ 0.0195 \\ -0.00790 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

iii.

$$\alpha_2 = \frac{(r^{(2)})^\top r^{(2)}}{(p^{(2)})^\top A p^{(2)}} \simeq 25.2$$

より，

$$x^{(3)} = x^{(2)} + \alpha_2 p^{(2)} \simeq \begin{bmatrix} -0.280 \\ 0.747 \\ 0.410 \end{bmatrix}$$

共役勾配法は，原理的には n ステップで解を得る．ゆえに，3 ステップ目の解 $x^{(3)}$ は，数値誤差がなければ厳密解である．しかし，ここでは近似をいれているので，残差が

$$r^{(3)} = b - Ax^{(3)} = r^{(2)} - \alpha_2 A p^{(2)} \simeq \begin{bmatrix} 0.107 \\ 0.0742 \\ 0.0527 \end{bmatrix}$$

と残ることに注意されたい．

したがって，パラメータの近似値は

$$\theta \simeq \begin{bmatrix} -0.280 \\ 0.747 \\ 0.410 \end{bmatrix}$$

である．

(c) 微分してゼロになる点は

$$\frac{d}{dx} g(x) = 2ax + b = 0 \quad \Rightarrow \quad x = -\frac{b}{2a} \simeq 1.34$$

である．しかし，真値は 1 であるので，誤差は 30%ほどある．これはパラメータの近似の悪さよりもむしろ，多項式の次数が近似に十分でないためである．図

を描いてみればわかるが，$f(x)$ は二次関数で近似できる形をしていない（二次関数は，極値を中心として対称的なグラフになるが，$f(x)$ は非対称である）．したがって，十分な精度を出すには，近似の次数を上げなければならない．

(d) 直接計算すればよい．

$$\bar{\varphi}(x) = \begin{bmatrix} 3x^2 - 6x + 2 \\ x - 1 \\ 1 \end{bmatrix} =: \begin{bmatrix} h_1(x) \\ h_2(x) \\ h_3(x) \end{bmatrix}$$

とすると，

$$\int_0^2 h_1(x)h_3(x)dx = \int_0^2 h_1(x)dx = \frac{3\times 2^3}{3} - \frac{6\times 2^2}{2} + 2\times 2 = 0,$$
$$\int_0^2 h_2(x)h_3(x)dx = \int_0^2 h_2(x)dx = \frac{2^2}{2} - 2 = 0,$$
$$\int_0^2 h_1(x)h_2(x)dx = \int_0^2 (3x^3 - 9x^2 + 8x - 2)dx = \frac{3\times 2^4}{4} - \frac{9}{3}2^3 + \frac{8}{2}2^2 - 2\times 2 = 0,$$

よって，

$$\bar{Q} := \int_0^2 \bar{\varphi}(x)\bar{\varphi}(x)^\top dx$$

の非対角成分はゼロになる．このとき，パラメータを求める問題は，

$$\bar{Q}\bar{\theta} = \int_0^2 \bar{\varphi}(x)f(x)dx =: \bar{\Phi}$$

の連立一次方程式を解けばよく，係数が対角行列の連立一次方程式は条件数に関係なく，高速かつ高精度に解ける．(講義では触れていないが）数値積分にかかる手間は多少増えるが，連立一次方程式の問題まで考えると，全体の計算量も削減できる．

3. (a) A の各行ベクトルは 1 次独立の関係にあるので，A は正則行列である．

$$\|x_1 - x_2\|_2 = \|A^{-1}(b_1 - b_2)\|_2 \le \|A^{-1}\|_2\|b_1 - b_2\|_2$$

である．一方，$b_1 \neq 0$ より $x_1 \neq 0$ なので，

$$\|b_1\|_2 = \|Ax_1\|_2 \le \|A\|_2\|x_1\|_2, \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{\|x_1\|_2} \le \frac{\|A\|_2}{\|b_1\|_2}$$

より，両辺を $\|x_1\|_2$ で割れば，

$$\frac{\|x_1 - x_2\|_2}{\|x_1\|_2} \le \|A\|_2\|A^{-1}\|_2\|b_1 - b_2\|_2 = \kappa(A)\|b_1 - b_2\|_2$$

(b)

$$A\begin{bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 & b_2 & b_3 \end{bmatrix}$$

より，各 x_i を求めれば，逆行列がもとまる．まず，Gauss の消去法を用いて，x_1 について解き，LU 分解を求めて x_2 と x_3 を求める．

$Ax_1 = b_1$ の両辺に左から次の行列をかける．

$$M_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -m_{21} & 1 & 0 \\ -m_{31} & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad m_{21} = \frac{a_{21}}{a_{11}} = \frac{1}{3},\ m_{31} = \frac{a_{31}}{a_{11}} = \frac{2}{3}$$

このとき，

$$\begin{aligned} A^{(1)}x =& b_1^{(1)}, \\ A^{(1)} :=& M_1 A = \begin{bmatrix} 3 & 5 & 7 \\ 0 & -\frac{2}{3} & -\frac{4}{3} \\ 0 & -\frac{7}{3} & -\frac{11}{3} \end{bmatrix}, \quad b^{(1)} := M_1 b_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ -\frac{1}{3} \\ -\frac{2}{3} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

次に，

$$M_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -m_{32} & 1 \end{bmatrix}, \quad m_{32} = \frac{a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} = \frac{7}{2}$$

を $A^{(1)}x_1 = b_1^{(1)}$ の両辺に左からかける．このとき，

$$\begin{aligned} A^{(2)}x_1 =& b_1^{(2)}, \\ A^{(2)} :=& M_2 A^{(1)} = \begin{bmatrix} 3 & 5 & 7 \\ 0 & -\frac{2}{3} & -\frac{4}{3} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad b_1^{(2)} := M_2 b_1^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 \\ -\frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

ここで後退代入していくと，$x_1 = (x_{i1})$ は，

$$x_{31} = \frac{1}{2}, \quad x_{21} = -\frac{3}{2}\left(-\frac{1}{3} + \frac{4}{3}x_{31}\right) = -\frac{1}{2}, \quad x_{11} = \frac{1}{3}(1 - 5x_{21} - 7x_{31}) = 0$$

以上より，LU 分解が次の通りに求まる．

$$\begin{aligned} L =& M_1^{-1}M_2^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ m_{21} & 1 & 0 \\ m_{31} & m_{32} & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & 1 & 0 \\ \frac{2}{3} & \frac{7}{2} & 1 \end{bmatrix} \\ U =& \begin{bmatrix} 3 & 5 & 7 \\ 0 & -\frac{2}{3} & -\frac{4}{3} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

ここで次の方程式を考える．

$$\begin{cases} Ly_i = b_i \\ Ux_i = y_i \end{cases}, \quad i = 2, 3$$

この方程式を解くと，

$$y_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ -\frac{7}{2} \end{bmatrix}, \quad y_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad x_2 = \begin{bmatrix} -1 \\ \frac{11}{2} \\ -\frac{7}{2} \end{bmatrix}, \quad x_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

を得る．よって，

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 1 \\ -\frac{1}{2} & \frac{11}{2} & -2 \\ \frac{1}{2} & -\frac{7}{2} & 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & -2 & 2 \\ -1 & 11 & -4 \\ 1 & -7 & 2 \end{bmatrix}$$

(c)

$$A^\top A = \begin{bmatrix} 14 & 18 & 24 \\ 18 & 27 & 37 \\ 24 & 37 & 51 \end{bmatrix}$$

であるので，ベクトルを規格化せずに計算すると，

$$x^{(1)} = A^\top A x^{(0)} = \begin{bmatrix} 14 \\ 18 \\ 24 \end{bmatrix},\ x^{(2)} = A^\top A x^{(1)} = \begin{bmatrix} 1096 \\ 1626 \\ 2226 \end{bmatrix},\ x^{(3)} = A^\top A x^{(2)} = \begin{bmatrix} 98036 \\ 145992 \\ 199992 \end{bmatrix}$$

となる．この最大固有値の近似値は，10 進 6 桁の浮動小数点数で表すと，

$$\frac{(x^{(3)})^\top x^{(3)}}{(x^{(3)})^\top x^{(2)}} = 89.7726$$

である．(これは数値計算で求めた最大特異値 89.7726 と 10 進 6 桁の浮動小数点数表示では一致する)

(d)

$$A^{-\top} A^{-1} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & -9 & 3 \\ -9 & 87 & -31 \\ 3 & -31 & 12 \end{bmatrix}$$

であるので，ベクトルを規格化せずに計算すると，

$$x^{(1)} = A^{-\top} A^{-1} x^{(0)} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 \\ -9 \\ 3 \end{bmatrix},\ x^{(2)} = A^{-\top} A^{-1} x^{(1)} = \frac{1}{4}\begin{bmatrix} 91 \\ -885 \\ 318 \end{bmatrix},$$

$$x^{(3)} = A^{-\top} A^{-1} x^{(2)} = \frac{1}{8}\begin{bmatrix} 9010 \\ -87672 \\ 31524 \end{bmatrix}$$

である．この最大固有値の近似値は，10 進 6 桁の浮動小数点数で表すと，

$$\frac{(x^{(3)})^\top x^{(3)}}{(x^{(3)})^\top x^{(2)}} = 49.5358$$

である．これはすなわち，$A^\top A$ の最小固有値が 1/49.5358 で与えられることを意味する．

(e) 条件数は 10 進 3 桁の浮動小数点数表示で 66.7 である（$\sqrt{89.7726 * 49.358}$ の 10 進 3 桁の浮動小数点数表示と同じ）．この数は，せいぜい 2 桁であり，市販の PC で十分処理できる程度のものである．しかし，10 進 2 桁の演算を行う場合は，計算結果が大きく変わりうる．最大特異値と最小特異値が 2 桁異なる場合，打ち切りによる丸め誤差が生じ，最小特異値に対応するベクトル成分が無視されうる．

4. 最大特異値は，$X^\top X$ あるいは $XX^\top$ の最も大きな固有値の平方根である．この手の計算は，次数の小さな行列にしたほうが，後の計算が楽になる．$XX^\top$ を計算すると，

$$XX^\top = \begin{bmatrix} 15 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 23 \end{bmatrix}$$

となるので，X の最大特異値は $\sqrt{23}$.

5. (a) ベクトル空間 X において，ノルム $\|\bullet\|$ が定められているとする．X の閉領域 U において関数 ϕ が縮小写像とは，次の二つが成り立つときをいう．

   - 任意の $x \in U$ に対して $\phi(x) \in U$,
   - 任意の $x, y \in U$ に対して，$\|\phi(x) - \phi(y)\| \le q\|x - y\|$ を満たす $q \in [0, 1)$ が存在する

   このとき，$x^{(k+1)} = \phi(x^{(k)})$ で記述されるアルゴリズムは，U 内に $x = \phi(x)$ を満たす唯一解を持つ．そのため，与えられた閉領域 U において ϕ が縮小写像であることが示せれば，反復法による数値計算結果が真値に収束する．

   (b) DKA 法とは，重複しない代数方程式の全ての根を求めるアルゴリズムの 1 つで，初期値を代数方程式の根を全て含む複素平面の円周上に，実軸に置かないように配置すれば，数値誤差のない限り，必ず真値へと収束する．収束は真値の周辺で二次収束であり，遠くに配置されても一次収束が保証されている．具体的なアルゴリズムは Newton 法の変形であり，

$$\begin{aligned} p_n(z) =& a_0 z^n + a_1 z^{n-1} + \cdots + a_{n-1} z + a_n \\ =& a_0 (z - \alpha_1) \cdots (z - \alpha_n) \end{aligned}$$

   なる多項式の根 α_i, $i = 1, 2, \cdots, n$ を知りたい場合，Newton 法では p_n の一階微分 p_n' を用いて

$$z_i^{(k+1)} = z_i^{(k)} + \frac{p_n(z_i^{(k)})}{p_n'(z_i^{(k)})}, \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

   とするが，分母の $p_n'(z_i^{(k)})$ の各根 α_j に近似値 $z_j^{(k)}$ を代入して，

$$z_i^{(k+1)} = z_i^{(k)} + \frac{p_n(z_i^{(k)})}{a_0 \prod_{j=1, j\neq i}^{n} (z_i^{(k)} - z_j^{(k)})}, \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

   としたものが DK 法（Duand–Kerner method）である．これに初期値の配置を前述の通りに工夫したものが，DKA 法（Durand–Kerner–Aberth method）である．

   (c) 講義では， Householder 法と Lanczos 法を紹介した．ここでは Householder 法を説明する．Householder 法とは，基本直交行列と呼ばれる直交行列を両側からかけることで，実対称行列を三重対角化する手法である．$x, y \in \mathbb{R}^n$ を互いに異なる 0 でないベクトルとし，

$$u := \frac{x - y}{\|x - y\|_2}$$

と定めると，$P := I - uu^\top$ は実直交行列になり，

$$Px = y$$

を満たす．ただし，I は単位行列である．この性質を利用し，実対称行列 $A = (a_{ij})$ に対し，

$$x = \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{n1} \end{bmatrix}, \quad y = \begin{bmatrix} a_{11} \\ \sqrt{\sum_{i=2}^{n} a_{i1}^2} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

として $u = (x - y)/\|x - y\|_2$, $P_1 = I - uu^\top$ とすると，

$$A^{(2)} = P_1 A P_1^\top = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21}^{(2)} & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21}^{(2)} & a_{22}^{(2)} & * & \cdots & a_{n2}^{(2)} \\ 0 & * & \ddots & & * \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & * & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix}$$

となる．次に

$$x = \begin{bmatrix} a_{21}^{(2)} \\ a_{22}^{(2)} \\ \vdots \\ a_{n2}^{(2)} \end{bmatrix}, \quad y = \begin{bmatrix} a_{21}^{(2)} \\ a_{22}^{(2)} \\ \sqrt{\sum_{i=3}^{n} (a_{i2}^{(2)})^2} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

として $u = (x - y)/\|x - y\|_2$, $P_1 = I - uu^\top$ とすると，

$$A^{(3)} = P_2 A^{(2)} P_2^\top = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21}^{(2)} & 0 & & \cdots & 0 \\ a_{21}^{(2)} & a_{22}^{(2)} & a_{32}^{(3)} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{32}^{(3)} & \ddots & & & * \\ \vdots & 0 & & & & \\ \vdots & \vdots & & & & \vdots \\ 0 & 0 & * & & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix}$$

となる．これを順次繰り返していくと，三重対角成分以外はゼロになり，有限回の演算で三重対角化が可能である．