

# 数値計算 参考問題（解答例（一部修正 7/16）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

2015 年 7 月 23 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. 2 つの連立一次方程式を考える。

$$A_1x = b, \quad A_2x = b$$

ただし，

$$A_1 = \begin{bmatrix} 1.001 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad A_2 = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 10^{-6} \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

とする。このとき，以下の問に答えよ。

- 行列  $A_1, A_2$  の条件数を求めよ。ただし，行列のノルムは，Euclid ノルムの誘導ノルムとする。解は 10 進 3 桁の浮動小数点数で表すこと（計算過程を 10 進 3 桁の浮動小数点数で行う必要はない）
- どちらの行列を用いたほうが解きやすいか，理由をつけて答えよ。
- 行列  $A_1$  を，次の行列を用いて相似変換する。

$$C = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

新たな行列  $\tilde{A}_1 = CA_1C^{-1}$  を求め，

$$\begin{aligned} \tilde{A}_1y &= Cb \\ Cx &= y \end{aligned}$$

から  $x$  を求めよ。ただし，解は 10 進 3 桁の浮動小数点数で表すこと（計算過程を 10 進 3 桁の浮動小数点数で行う必要はない）

- (d) 相似変換した行列  $\tilde{A}_1$  による連立一次方程式と、相似変換する前の連立一次方程式では、どちらが計算精度が高いと考えられるか、理由をつけて述べよ。

2. Riccati 代数方程式と呼ばれる、次の非線形行列方程式を考える。

$$AX + XA^\top - XQX + I = 0 \quad (1)$$

ただし、

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

であり、 $I$  は単位行列である。また、 $A^\top$  は行列  $A$  の転置を意味する。このとき、以下の問に答えよ。

- (a) この問題の場合、解は対称行列で与えられることが知られている。 $X$  と  $x$  をそれぞれ

$$X = \begin{bmatrix} x_1 & x_3 \\ x_3 & x_2 \end{bmatrix}, \quad x := \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{bmatrix}^\top, \quad x_i \in \mathbb{R},$$

とおき、問題 (1) を次の連立代数方程式を解く問題に帰着させたい。

$$f(x) := \begin{bmatrix} f_1(x) \\ f_2(x) \\ f_3(x) \end{bmatrix} = 0$$

各関数  $f_i$  を求めよ。

- (b) 初期値を  $x = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}^\top$  とし、Newton 法を用いて 2 ステップ計算せよ。解は 10 進 3 桁の浮動小数点数で表示すること（計算過程では必要ない）
- (c) ベクトルに直さず、行列方程式のまま Newton 法を適用したい。次の手順で、Newton 法を求めよ。

- i.  $F: \mathbb{R}^{2 \times 2} \rightarrow \mathbb{R}^{2 \times 2}$  を、

$$F(X) := AX + XA^\top - XQX + I$$

と定める。また、 $Y = Y^\top \in \mathbb{R}^\top$  とする。このとき、 $F$  の  $X$  における  $Y$ -方向微分

$$L_X(Y) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F(X + \epsilon Y) - F(X)}{\epsilon}$$

を求めよ。また、これは  $Y$  についての線形写像になっていることを確認せよ。

- ii. Newton 法は、 $X = X^{(k)}$ 、 $Y = X^{(k+1)} - X^{(k)}$  とおき、

$$F(X^{(k)}) + L_{X^{(k)}}(X^{(k+1)} - X^{(k)}) = 0$$

を計算することで得られる。

$$X^{(k+1)} = X^{(k)} - L_{X^{(k)}}^{-1}(F(X^{(k)}))$$

$L_X(Y) = M$  の逆写像  $L_X^{-1}(M)$  をどのようにして求めればよいか、示せ。



## 解答例

1. (a) Euclid ノルムを用いたときの行列  $A$  の条件数  $\kappa(A)$  とは,  $A^\top A$  の最大固有値の平方根と, 最小固有値の平方根の逆数との積である. とくに対称行列の場合は, 特異値は行列の固有値の“絶対値”と一致するので,  $A_1$  の場合は固有値を計算すればよい.  $\epsilon = 0.001$  とおくと,

$$\det(\lambda I - A_1) = \lambda^2 - (2 + \epsilon)\lambda + \epsilon = 0$$

より,

$$\begin{aligned}\lambda_{A_1\pm} &= \frac{1}{2} \left( 2 + \epsilon \pm \sqrt{4 + \epsilon^2} \right) \\ &= \frac{1}{2} \{ 2 + \epsilon \pm 2 \}\end{aligned}$$

である. これより,

$$\kappa(A_1) \simeq \frac{2 + \frac{1}{2}\epsilon}{\frac{1}{2}\epsilon} = \frac{4 + \epsilon}{\epsilon} = 4.001 \times 10^3 \simeq 4.00 \times 10^3$$

となる. 次に  $\kappa(A_2)$  を求めよう.  $A_2$  は対称行列ではないので, 定義通りに計算する.

$$\det(\sigma I - A_2^\top A_2) = \sigma^2 - (2 + \epsilon^4)\sigma + \epsilon^4 = 0$$

より,

$$\sigma_{A_2\pm} = \begin{cases} 2, \\ \epsilon^4 \end{cases}$$

よって,

$$\kappa(A_2) = \sqrt{\frac{2}{\epsilon^4}} = \frac{\sqrt{2}}{\epsilon^2} \simeq 1.41 \times 10^6$$

- (b) 条件数は悪いが,  $A_2$  を用いた連立一次方程式のほうが解きやすい. 連立一次方程式の解を求める問題は, 直線の交点を求める問題であるが,  $A_1 x = b$  で表現される2つの直線の方が, より並行になっているため, 数値誤差の影響を受けやすい. ただし, この問題の設定に限れば, 例えば10進数で計算したときは, どちらも難しさは変わらない.  $b$  が厳密には浮動小数点数表示で表せない場合に, 大きく解が異なりやすいのは,  $A_1$  を用いた場合である.
- (c) 相似変換後の行列は,

$$\tilde{A}_1 = \begin{bmatrix} 0.001 & 0.001 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, \quad Cb = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

である. これより,

$$y = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

を得る. さらに,  $Cx = y$  より,

$$x = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

を得る.

2. (a)  $X$  を式 (1) へ代入して整理すると,

$$\begin{bmatrix} -4x_1 + 2x_3 + 1 & x_2 - 3x_3 \\ x_2 - 3x_3 & -x_2^2 - 2x_2 + 1 \end{bmatrix} =: \begin{bmatrix} f_1(x) & f_3(x) \\ f_3(x) & f_2(x) \end{bmatrix} = 0$$

すなわち,

$$f(x) = \begin{bmatrix} f_1(x) \\ f_2(x) \\ f_3(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -4x_1 + 2x_3 + 1 \\ -x_2^2 - 2x_2 + 1 \\ x_2 - 3x_3 \end{bmatrix}$$

を得る.

(b) Newton 法のアルゴリズムは,

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - J(x^{(k)})^{-1}f(x^{(k)}), \quad J(x) := \frac{\partial f(x)}{\partial x^\top}$$

である. 先程求めた  $f$  を具体的に代入すれば,

$$J(x) = \begin{bmatrix} -4 & 0 & 2 \\ 0 & -2(x_2 + 1) & 0 \\ 0 & 1 & -3 \end{bmatrix}$$

となり,  $\det(J(x)) = -24(x_2 + 1)$  なので,  $x_2 \neq -1$  以外では正則な行列になる. 正則性の仮定の下で,  $J(x)^{-1}$  は,

$$\begin{aligned} J(x)^{-1} &= \frac{1}{\det(J(x))} \begin{bmatrix} 6(x_2 + 1) & 2 & 4(x_2 + 1) \\ 0 & 12 & 0 \\ 0 & 4 & 8(x_2 + 1) \end{bmatrix} \\ &= \frac{-1}{12(x_2 + 1)} \begin{bmatrix} 3(x_2 + 1) & 1 & 2(x_2 + 1) \\ 0 & 6 & 0 \\ 0 & 2 & 4(x_2 + 1) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

となる.

以上で計算の準備が整った. 最初のステップは,

$$J(x^{(0)})^{-1} = \frac{-1}{24} \begin{bmatrix} 6 & 1 & 4 \\ 0 & 6 & 0 \\ 0 & 2 & 8 \end{bmatrix}, \quad f(x^{(0)}) = \begin{bmatrix} -3 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

より,

$$x^{(1)} = x^{(0)} - J(x^{(0)})^{-1}f(x^{(0)}) = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 1 \end{bmatrix}$$

次のステップは,

$$J(x^{(1)})^{-1} \simeq \begin{bmatrix} -0.25 & -0.0417 & -0.1667 \\ 0 & -0.25 & 0 \\ 0 & -0.0833 & -0.3333 \end{bmatrix}, \quad f(x^{(1)}) = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} -3 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

より,

$$x^{(2)} = x^{(1)} - J(x^{(1)})^{-1}f(x^{(1)}) \simeq \begin{bmatrix} 0.3194 \\ 0.4167 \\ 0.1389 \end{bmatrix} \simeq \begin{bmatrix} 0.319 \\ 0.417 \\ 0.139 \end{bmatrix}$$

を得る.

(補足) この問題は, 非線形な方程式が  $x_2$  のみに限られているので, 解析的に解を求められる.

$$x_1 = \frac{1}{4} \left( \frac{2}{3}x_2 + 1 \right), \quad x_2 = -1 \pm \sqrt{2}, \quad x_3 = \frac{1}{3}x_2$$

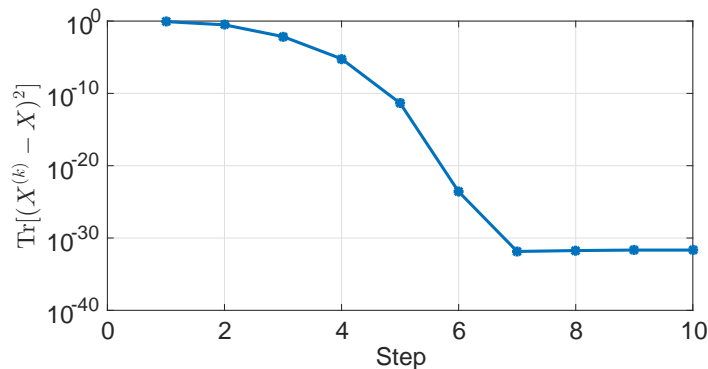
問題の設定では, 正定値行列が得られるので,  $x_2 = -1 + \sqrt{2}$  の場合が解になる. このとき, Riccati 方程式の解は

$$X^* = \begin{bmatrix} 0.3190 & 0.1381 \\ 0.1381 & 0.4142 \end{bmatrix}$$

となる (10 進 4 桁の浮動小数点数で表示). 2 つのステップでも, かなり近い値が得られており,

$$x^{(3)} \simeq \begin{bmatrix} 0.3194 \\ 0.4142 \\ 0.1387 \end{bmatrix}, \quad x^{(4)} \simeq \begin{bmatrix} 0.3190 \\ 0.4142 \\ 0.1381 \end{bmatrix}$$

であり, 非常に速く収束することがわかる. 真値との誤差を, 各行列要素の二乗和で定義し, 10 ステップまで計算した数値結果を, 片対数グラフとして図 2b に示す.



(c) i. 定義どおりに計算する.

$$F(X + \epsilon Y) - F(X) = \epsilon \{ (A - XQ)Y + Y(A - XQ)^\top \} - \epsilon^2 YQY$$

であるので,

$$L_X(Y) = (A - XQ)Y + Y(A - XQ)^\top$$

を得る. また, 任意の  $Y_1, Y_2 \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$  および  $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$  に対して

$$L_X(\alpha Y_1 + \beta Y_2) = \alpha L_X(Y_1) + \beta L_X(Y_2)$$

が成り立つので、 $L_X$  は線形写像である。

(行列の微分に関する補足) この問題で用いた、行列から行列への関数の微分は、Gateau 微分、Frechet 微分という関数解析で用いられる微分概念を用いている。これらは変分法の数学的基礎であり、物理学や最適化問題などの様々な場面で現れる。関数の微分とは、その接線における直線を求めていることになるので、局所的な線形方程式化を意味している。

線形写像で表しているのだから、初見ではわかりにくいかもしれない。そこで、対応関係を見るために、関数  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  の点  $x$  における Taylor 展開を考えると、

$$f(x + \delta x) - f(x) = f(x) + \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x)}{\partial x_i} \delta x_i + \dots$$

は、 $\delta x$  を  $y \in \mathbb{R}^n$  と任意の (微小な)  $\epsilon > 0$  で  $\delta x = \epsilon y$  と置き直せば、

$$f(x + \epsilon y) - f(x) = f(x) + \underbrace{\epsilon \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x)}{\partial x_i} y_i}_{=: L_x(y)} + \dots$$

である。この線形写像  $L_x: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  が、単純な行列 (微係数) とベクトルの掛け算に置き換えられるので、ベクトル値関数を考える場合は微係数のみを考えればよい。行列の掛け算が、線形写像となっていることが、ここでは重要。

ii. 求めなければならない問題は、

$$L_X(Y) = -F(X)$$

から  $Y$  を求める方法を導くことである。 $L_X$  が線形写像であることから、連立一次方程式の応用であることに気がつけば早い。 $F(X)$  は、持っている情報からすぐに計算できるため、与えられているものとして計算すると、結局

$$BY + YB^\top = M, \quad B := (A - XQ), \quad M := -F(X)$$

という方程式 (Lyapunov 方程式) を解けばよいことになる。 $Y$  と  $M$  が対称行列であることに注意して、それぞれ次のようにパラメータ化する。

$$Y = \begin{bmatrix} y_1 & y_3 \\ y_3 & y_2 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} b_1 & b_2 \\ b_3 & b_4 \end{bmatrix}, \quad M = \begin{bmatrix} m_1 & m_3 \\ m_3 & m_2 \end{bmatrix}$$

ここで

$$\begin{aligned} BY + YB^\top &= \begin{bmatrix} 2b_1 y_1 + 2b_2 y_3 & b_3 y_1 + b_2 y_2 + (b_1 + b_4) y_3 \\ b_3 y_1 + b_2 y_2 + (b_1 + b_4) y_3 & b_4 y_2 + b_3 y_3 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} m_1 & m_3 \\ m_3 & m_2 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

より、次の連立一次方程式の問題へと帰着できる。

$$\begin{bmatrix} 2b_1 & 0 & 2b_2 \\ 0 & 2b_4 & 2b_3 \\ b_3 & b_2 & b_1 + b_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \end{bmatrix}$$

これを、例えば Gauss の消去法で解けば、 $Y = L_X^{-1}(M)$  を求められる。

3. TBA (とくに捻った問題ではないので、教科書、web スライド、講義ノートなどを見て解いてください)

4. (a) 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。

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

ここで  $f' = \frac{\partial f}{\partial x}$  である。各ステップ  $k$  において、点  $(x^{(k)}, f(x^{(k)}))$  から関数  $f$  の接線を引き、その直線が  $0$  と交わるところを新たな更新値  $x^{(k+1)}$  として採用することで、解を探索する収束させるアルゴリズムである。

(b) 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  $\phi$  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、 $\|\phi(x) - \phi(y)\| \leq q\|x - y\|$  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  $\phi$  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。

(c) Gauss-Seidel 法とは、連立一次方程式  $Ax = b$  を解く反復法の 1 つである。  $A$  を対角成分、下三角成分、上三角成分に分解すると、

$$A = D + E + F$$

となるので、連立一次方程式を

$$Ax = b \implies Dx = b - (E + F)x$$

に分解できる。ここで左辺の  $x$  を更新値  $x^{(k+1)}$ 、右辺の  $x$  を現在の推定値  $x^{(k)}$  とすると、

$$x^{(k+1)} = D^{-1} \{b - (E + F)x^{(k)}\}$$

が得られる。ここでアルゴリズムを細かく見てみると、 $j$  番目の要素の更新は

$$x_j^{(k+1)} = a_{jj}^{-1} \left\{ b_j - \sum_{i=1}^{j-1} a_{j,i} x_i^{(k)} - \sum_{i=j+1}^n a_{j,i} x_i^{(k)} \right\}$$

であり、右辺の  $x_i^{(k)}$ 、 $i < j$  ではすでに更新した値を用いることができる。そこで

$$x_j^{(k+1)} = a_{jj}^{-1} \left\{ b_j - \sum_{i=1}^{j-1} a_{j,i} x_i^{(k+1)} - \sum_{i=j+1}^n a_{j,i} x_i^{(k)} \right\}$$



と書き直し，行列の形で整理すると，

$$x^{(k+1)} = -(D + E)^{-1}Fx^{(k)} + (D + E)^{-1}b$$

を得る．この更新則にしたがって値を更新する方法が，Gauss-Seidel 法である

- (d) 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，

$$\begin{aligned} p_n(z) &= a_0z^n + a_1z^{n-1} + \cdots + a_{n-1}z + a_n \\ &= a_0(z - \alpha_1) \cdots (z - \alpha_n) \end{aligned}$$

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

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

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

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

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．初期値配置は，具体的には次のようになる．

$$z_i^{(0)} = -\frac{a_1}{n} + r_0 \exp\left(\sqrt{-1} \left(\frac{2(i-1)\pi}{n} + \frac{\pi}{2n}\right)\right), \quad i = 1, 2, \dots, n$$

ただし， $r_0$  は  $p_n$  の全ての根を含む円の半径である．

- (e) 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， $P := I - uu^T$  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  $u = (x - y)/\|x - y\|_2$ ,  $P_2 = I - uu^\top$  とすると,

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

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 ( $n - 2$  回) で三重対角化が可能である.