数値計算 試験問題（誤植訂正）

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)

試験中の注意

- 電卓および電卓機能を有する携帯端末の持ち込み可（6 インチ以下のサイズのみ.）
- 教科書・ノート等，およびそれに類する電子ファイルの閲覧は不可.
- 電卓機能および計時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.
- どうしても解けない場合，問題の意味を損なわない程度に簡単にして解いてよい．簡単にする旨を明記して解くこと．この場合，配点の 8 割を上限とし，作成した問題の程度に応じて減点する.
- とくに指定されてない場合，計算過程は 10 進数で 3 桁以上の浮動小数点数表示で行うこと.

1. 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.

   (A1) 任意の $x \in U$ に対して $\phi(x) \in U$,

   (A2) $\|\phi(x) - \phi(y)\| \le q\|x - y\|$，$\forall x, y \in U$，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を示せれば，反復法による数値計算結果が U 内の唯一の解に収束することが保証される．以下の問に答えよ.

   (a) (A1) が成り立たない場合，次から正しい記述を選択せよ（複数選択可）.

   （ア） U 内に $\phi(x) = x$ を満たす解は存在しない.

   （イ） X 内に $\phi(x) = x$ を満たす解が存在するとは限らない.

   （ウ） 他の閉領域 U' を選ぶと，ϕ が U' における縮小写像となる可能性がある.

   （エ） 選択肢（ア），（イ），（ウ）は，全て誤りである.

   (b) ステップ数 k に依存する関数 $q_k \in [0, 1)$, $k = 1, 2, \cdots$ は，その極限が $\lim_{k\to\infty} q_k = 1$ であるとする．いま，(A1) を満たすが (A2) を満たさない写像 ϕ が与えられ，このような q_k に対しては，任意の初期値 $x^{(0)} \in U$ に対して，

   $$\|\phi(x^{(k+1)}) - \phi(x^{(k)})\| \le q_k\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$$

   がある閉領域 U で成り立つとする．この ϕ を用いた反復法では，何が問題になるか，説明せよ．例があれば望ましい.

(c) $\phi : U \to U$, $U := [1, \infty) \times \mathbb{R}^n$ を次で定義する（集合論では U は閉領域である）.

$$\phi(t, x) := \left[\left(1 - \frac{1}{t^2+1}\right) t + 1, \quad \left(1 - \frac{1}{t^2+1}\right) x + \vec{1}\right]^\top$$

ただし，$\vec{1} \in \mathbb{R}^n$ は各要素が 1 の n 次元ベクトルである．ノルムを Euclid ノルム $\|(t, x^\top)^\top\| := \sqrt{t^2 + \sum_{i=1}^n x_i^2}$ としたとき，この写像 ϕ は，縮小写像か？また，次の反復法の極限はどうなるか答えよ．

$$\begin{bmatrix} t^{(k+1)} \\ x^{(k+1)} \end{bmatrix} = \phi\left(t^{(k)}, x^{(k)}\right), \quad k = 1, 2, \cdots, \quad t^{(1)} = 1$$

2. Newton 法について，次の問に答えよ．

(a) $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ とし，微分可能であるとする．このとき，$f(x) = 0$ となる点 $x \in \mathbb{R}^n$ を求めたい．Newton 法のアルゴリズムを示せ．

(b) 関数 $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^2$ が次で与えられているものとする．

$$f(x) = \begin{bmatrix} (x-1)(x+1) \\ (x-1)(x+3) \end{bmatrix}$$

このとき，次のアルゴリズムで更新することで，$f(x) = 0$ を得たい．

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - g(x^{(k)}), \quad k = 1, 2, \cdots$$

Newton 法で行うとして，関数 g を f とその微分 f' を用いて求めよ．

(c) f の代わりに次の関数を考える：$f_1(x) = x^2 - 1$．初期値を $x^{(1)} = 2$ とし，Newton 法で 2 ステップ後の $x^{(3)}$ の値を求めよ．解は，10 進 3 桁の浮動小数点数で表すこと．

3. 2 つの連立一次方程式を考える：$A_1 x = b$, $A_2 x = b$．ただし，

$$A_1 = \begin{bmatrix} 1 & 1.001 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad A_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -10^{-6} \end{bmatrix}, \quad b \in \mathbb{R}^2$$

とする．このとき，以下の問に答えよ．

(a) 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．

(b) 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．

(c) 解きにくい連立一次方程式は，適切な前処理をすることで解きやすくなる．行列 A_1 で記述される連立一次方程式を解きやすくするには，どのような工夫をすればよいか？

4. 実対称行列の固有値問題の解法を 1 つ挙げ，そのアルゴリズムと特徴を説明せよ．

解答例

1. (a) （イ）と（ウ）が正解.

（ア）について U 内に $\phi(x)=x$ を満たす解は存在しうるが，初期点の位置が悪いなどの問題で，U から出て行ってしまうことがあるため,（ア）は不正解. 例えば，$X=\mathbb{R}^2$ として，

$$\phi(x)=Ax, \quad A=\begin{bmatrix}0.5 & 10\\ 0 & 0.5\end{bmatrix}$$

とし，$U=\{x\in\mathbb{R}^2 \mid x^\top x\le 1\}$ とする．この ϕ は,

$$A^\top PA+I=P$$

を満たす正定値対称行列 P を用いたノルム $\|x\|_P:=\sqrt{x^\top Px}$ に対して，(A2) の条件を満たす，すなわち $q\in[0,1)$ が存在して，

$$\|\phi(x)-\phi(y)\|_P\le q\|x-y\|_P, \quad \forall x,y\in U$$

となる．しかし，

$$x^{(0)}=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}\in U, \quad \to \quad x^{(1)}=Ax^{(0)}=\begin{bmatrix}10\\0.5\end{bmatrix}\notin U$$

となるので，(A1) は成り立たない．また，$x=\phi(x)$ を満たす解は，$x=0\in U$ であるので，これは（ア）の反例になる.

（イ）について 作為的に写像 ϕ を作成してみよう．ϕ は U 上で連続関数になることに注意する．$X=\mathbb{R}$ とし，$U=[-1,1]$ とする.

$$\phi(x)=\begin{cases}\frac{1}{10}x+10, & x\in U\\ 10x, & x\notin U\end{cases}$$

とすると，任意の $x,y\in U$ に対して

$$|\phi(x)-\phi(y)|=\frac{1}{10}|x-y|$$

であり，(A2) の条件を満たす．しかし，任意の $x\in U$ に対して $\phi(x)\notin U$ であり，$+\infty$ に発散していく．$x\in(-\infty,-1)$ の値を用いた場合は $-\infty$ に発散していく．したがって,（イ）は正しい.

（ウ）について 明らかである．上の（ア）について述べた例で,

$$U'=\{x\in\mathbb{R}^2 \mid x^\top Px\le 1\}$$

という楕円を選ぶと，ϕ は U' 上で縮小写像になる.

（エ）について （イ）と（ウ）が成り立つので，この選択肢は誤りである.

(b) 収束先が発散する，すなわち収束先が存在しない場合がある．問題 (c) が例となるが，ここではもっと簡単な例を挙げよう．$U=\mathbb{N}\times\mathbb{R}^n$ とする．ここで ϕ を次で定める.

$$\phi(k,x):=\begin{bmatrix}k+1\\ \left(1-\dfrac{1}{k^2+1}\right)x+1\end{bmatrix}$$

この ϕ は，U から U への写像となるので，(A1) を満たす．また，

$$\phi(k+1, x^{(k+1)}) - \phi(k, x^{(k)}) = \begin{bmatrix} 1 \\ \left(1 - \dfrac{1}{(k+1)^2+1}\right) x^{(k+1)} - \left(1 - \dfrac{1}{k^2+1}\right) x^{(k)} \end{bmatrix}$$

であり，

$$\left(1 - \frac{1}{(k+1)^2+1}\right) x^{(k+1)} - \left(1 - \frac{1}{k^2+1}\right) x^{(k)} < \left(1 - \frac{1}{k^2+1}\right) \left(x^{(k+1)} - x^{(k)}\right)$$

であるので，$\|\bullet\|_n$ を $\mathbb{R}^n$ の Euclid ノルムとすれば，

$$\begin{aligned} \|\phi(k+1, x^{(k+1)}) - \phi(k, x^{(k)})\|_{n+1} &< \sqrt{1 + \left(1 - \frac{1}{k^2+1}\right) \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|_n} \\ &< \left\| \left[(k+1) - k, \quad (x^{(k+1)} - x^{(k)})^\top \right]^\top \right\|_{n+1} \end{aligned}$$

である．上の不等式に等号が成り立たないのがポイントで，ステップ k に依存する $q_k \in [0, 1)$ が存在して，

$$\|\phi(k+1, x^{(k+1)}) - \phi(k, x^{(k)})\|_{n+1} \le q_k \left\| \left[(k+1) - k, \quad (x^{(k+1)} - x^{(k)})^\top \right]^\top \right\|_{n+1}$$

が成り立つ．この q_k は，

$$\lim_{k \to \infty} q_k = 1$$

となり，問題の例を満たす．この反復法では，明らかに k が発散するため，収束しない．

(c) ϕ は縮小写像ではない．これを確かめるために，(A2) を満たしているか確認する．

$$\|\phi(t, x) - \phi(t, y)\| = \frac{t^2}{t^2+1} \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - y_i)^2}, \quad \forall t \in [1, \infty),\ \forall x, y \in \mathbb{R}^n$$

が成り立つが，t は大きくすることでいくらでも 1 に近づけるので，定数 $q \in [0, 1)$ で抑えられない[1]．

また，

$$h(t) := \left(1 - \frac{1}{t^2+1}\right) t + 1$$

とすると，

$$h(t) - t = 1 - \frac{1}{t^2+1} > 0, \quad \forall t \in [1, \infty)$$

であるので，$t^{(k)}$ は狭義単調増加であり，発散していく．任意の $q \in [0, 1)$ に対し，十分大きな K では，

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} &= \left(1 - \frac{1}{(t^{(k)})^2+1}\right) x^{(k)} + 1, \\ y^{(k+1)} &= q y^{(k)} + 1, \quad k \ge K,\ y^{(K)} = x^{(K)} \end{aligned}$$

[1]念のため．本来は $\|\phi(t, x) - \phi(\tau, y)\|$ として全ての $t, \tau \in \mathbb{R}$ および $x, y \in \mathbb{R}^n$ に対して調べなければならないが，ここでは成り立たない反例を 1 つ提示すれば十分である．それゆえ，$\tau = t$ とした．

として $x^{(k)} > y^{(k)}$，$k > K$ とできる．

$$\lim_{k\to\infty} y^{(k)} = \frac{1}{1-q}$$

となるが，これが任意の $q \in [0,1)$ に対して成り立つので，$x^{(k)}$ の極限はいくらでも大きくでき，発散する．
直観的には，$x^{(k)}$ の更新は以下のように近似でき，各ステップで定数 1 が入り続けるので，発散していく．

$$x^{(k+1)} = \left(1 - \frac{1}{(t^{(k)})^2+1}\right) x^{(k)} + \vec{1} \simeq x^{(k)} + \vec{1} \xrightarrow{k\to\infty} (\infty)_{i=1}^{n}$$

2. (a) Newton 法のアルゴリズムは，

$$f(x^{(k)}) + f'(x^{(k)})(x^{(k+1)} - x^{(k)}) = 0$$

より，

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

(b) f が異なる次元のベクトル空間への写像になっていることに注意．また，$g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ であることにも注意．連立一次方程式において，行数が列数より大きい場合は，$A^\top Ax = A^\top b$ として，問題のサイズを正方行列に帰着させて解くことができた．それと同じようにして解けばよい．Newton 法では，先程と同様に

$$f(x^{(k)}) + f'(x^{(k)})(x^{(k+1)} - x^{(k)}) = 0 \tag{1}$$

を解けばよい．ここで，

$$f'(x) = \begin{bmatrix} 2x \\ 2x+2 \end{bmatrix}$$

である．$f(x)$ の各要素は共通の零点を持っているので，定数倍して足す分には，共通零点の位置は変わらない．そこで式 (1) の左から適当なベクトル $y \in \mathbb{R}^2$ の転置をかけると，

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \underbrace{\frac{y^\top f(x^{(k)})}{y^\top f'(x^{(k)})}}_{=g(x^{(k)})} = x^{(k)} - g(x^{(k)})$$

と書くことができるが，このとき

$$y^\top f'(x) = 2y_1 x + 2y_2(x+1) = 0$$

となる点 $x = -y_2/(y_1+y_2)$, $y_1 \neq -y_2$，でゼロ割が生じる．この点を避けるように初期値を選ばなければなければならない．ここで，Newton 法の更新式は

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{(x-1)((y_1+y_2)x + y_1 + 3y_2)}{2(y_1+y_2)x + 2y_2}$$

となる．とくに $y_1 = -y_2$ の場合，

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{y^\top f(x^{(k)})}{2y_2} = x^{(k)} - \left(x^{(k)} - 1\right) = 1$$

となり，1ステップで $f(x)=0$ の解を得る．

補足 ここで f' の転置を左からかけると，

$$f'(x^{(k)})^\top f(x^{(k)})+\underbrace{f'(x^{(k)})^\top f'(x^{(k)})}_{=:\|f'(x^{(k)})\|_2^2}(x^{(k+1)}-x^{(k)})=0$$

より，

$$x^{(k+1)}=x^{(k)}-\frac{f'(x^{(k)})^\top f(x^{(k)})}{\|f'(x^{(k)})\|_2^2}$$

$f'(x)=0$ となる x は存在しないので，ゼロ割の心配はない．しかし，これは $f'(x)^\top f(x)=0$ の点に収束してしまうので，注意が必要である．

$$f'(x)^\top f(x)=2(x-1)(x+1)(2x+3)$$

であるので，この問題の場合，根が1つ増える．上のやり方に比べて，さらに初期値をうまく選ばなければいけない．これも正解の対象とするが，初期値についての言及がついてないと少し減点．

(c) Newton 法で解けばよいので，

$$\begin{aligned}x^{(2)}=&x^{(1)}-\frac{f_1(x^{(1)})}{f_1'(x^{(1)})}=2-\frac{3}{4}=\frac{5}{4}\\x^{(3)}=&x^{(2)}-\frac{f_1(x^{(2)})}{f_1'(x^{(2)})}=\frac{5}{4}-\frac{9}{40}=\frac{41}{40}=1.025\simeq 1.03\times 10^0\end{aligned}$$

となる．

3. (a) Euclid ノルムの誘導ノルムを用いる場合，行列 A の条件数は，A の最大特異値を最小特異値で割った値になる．

A_1 の条件数 A_1 の場合を考える．$\epsilon=0.001$ とすると，

$$A_1=\begin{bmatrix}1&1\\1&1\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}0&\epsilon\\0&0\end{bmatrix}$$

と表せる．最大特異値，最小特異値はそれぞれ

$$\max_{x\in\mathbb{R}^2\setminus\{0\}}\frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2},\quad \min_{x\in\mathbb{R}^2\setminus\{0\}}\frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2}$$

とも表せるので，$U\in\mathbb{R}^{2\times 2}$，$U^\top U=I$ を用いて

$$\frac{\|AUU^\top x\|_2}{\|U^\top x\|_2}=\frac{\|AUy\|_2}{\|y\|_2},\ y=Ux$$

に注意すると，

$$U=\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}$$

を用いて

$$\max_{x\in\mathbb{R}^2\setminus\{0\}}\frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2}=\max_{y\in\mathbb{R}^2\setminus\{0\}}\frac{\|AUy\|_2}{\|y\|_2},\ \min_{x\in\mathbb{R}^2\setminus\{0\}}\frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2}\ \min_{y\in\mathbb{R}^2\setminus\{0\}}\frac{\|AUy\|_2}{\|y\|_2}$$

と問題を変換できる．したがって，

$$B = A_1 U = \begin{bmatrix} 1+\epsilon & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

の特異値を求める問題と等価になる．$B = B^\top$ なので，この固有値の絶対値を求めれば，それぞれ A_1 の最大特異値と最小特異値に一致する．特性方程式は，

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

より，

$$\lambda_\pm = \frac{1}{2}\left(2+\epsilon \pm \sqrt{4+\epsilon^2}\right) \simeq \frac{1}{2}(2+\epsilon\pm 2)$$

を得るので，条件数は

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

である．

【別解】　定義に則って，

$$A_1^\top A_1 = \begin{bmatrix} 2 & 2+\epsilon \\ 2+\epsilon & 2+2\epsilon+\epsilon^2 \end{bmatrix}$$

である．特性方程式は，

$$(\lambda-2)(\lambda-2-2\epsilon-\epsilon^2) - (2+\epsilon)^2 = \lambda^2 - (4+2\epsilon+\epsilon^2)\lambda + \epsilon^2 = 0$$

より，

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

である．平方根の計算をしなければならないが，Taylor 展開を用いる．条件数は $\sqrt{\lambda_+/\lambda_-}$ なので，Taylor 展開は ϵ^3 以上の項を無視すると，

$$\sqrt{(4+2\epsilon+\epsilon^2)^2 - 4\epsilon^2} \simeq 4+2\epsilon+\frac{1}{2}\epsilon^2$$

を得る．したがって，

$$\lambda_+ \simeq 4+2\epsilon+\frac{3}{4}\epsilon^2, \quad \lambda_- \simeq \frac{1}{4}\epsilon^2$$

であり，

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

なお，Taylor 展開を ϵ の 1 次まででやめると，λ_- がゼロになるので，発散する．

A_2 の条件数 A_2 は対称行列なので，条件数は絶対値最大の固有値と絶対値最小の固有値の比となる．したがって，

$$\kappa(A_2) = 10^6$$

(b) A_2 の方が解きやすい．10 進数で計算する場合，指数部のみ変化させることで解が求められるため．

(c) A_1 を適切な正則行列 C で相似変換し，$A_1' = CA_1C^{-1}$，$y = Cx$ として，

$$\begin{aligned} A_1'y =& Cb \\ Cx =& y \end{aligned}$$

を解けばよい．例えば,

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

と選べば,

$$A_1' = \begin{bmatrix} 0 & 0.001 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$

となる．この変換では，実は条件数が悪くなるのだが，x_2 は浮動小数点数表示の指数部の計算のみで求まるため，精度よく求められる．

4. 実対称行列の固有値問題の解法は，2 種類紹介した．Jacobi 法と，三重対角化（Householder 法，Lanczos 法）と三重対角行列の固有値問題である．固有値の求め方と，固有ベクトルの求め方の 2 つを求める必要がある．ここでは， Jacobi 法を説明する．

p, q 行および p, q 列に対して回転操作を与える行列

$$P = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & \cos(\phi) & \cdots & \sin(\phi) & & \\ & & \vdots & \ddots & \vdots & & \\ & & -\sin(\phi) & \cdots & \cos(\phi) & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

を用いて，$A \mapsto P^\top AP$ により $(P^\top AP)_{pq} = (P^\top AP)_{qp} = 0$ となるよう，ϕ を選ぶことができる．(p, q) を変えてこの操作を繰り返すことで，A を対角化する方法が，Jacobi 法である．このとき，非対角成分の二乗総和が 1 次収束することを示すことができる．ステップ k での操作を P_k で表すと，$Q = \lim_{n\to\infty} P_1P_2 \cdots P_n$ の各列ベクトルが，A の固有ベクトルになる．Jacobi 法は，小規模，中規模の固有値問題を精度よく解くことができる．また，固有ベクトルの直交性がよく保たれる．