数値計算 参考問題（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

試験日予定日： 2016 年 7 月 28 日 (木曜日 5 時限)

1. 要素の全てが非負の行列を非負行列といい，とくに $A = (A_{ij}) \in \mathbb{R}^{n\times n}$ の行和が 1 になるものを確率行列という（すなわち，$\sum_{i=1}^{n} A_{ij} = 1,\ j = 1, \dots, n$）．このとき，以下の問いに答えよ．

   (a) 確率行列 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ に対し，$y = Ax$ とすると，$\displaystyle\sum_{i=1}^{n} y_i = \sum_{i=1}^{n} x_i$ を満たすことを示せ．ただし，x_i，y_i は x と y の i 番目の要素である．

   (b) 確率行列は，確率ベクトル（要素が非負で，要素の総和が 1 となるベクトル）の遷移を表す．ここで天気について考えよう．起こり得る事象は，晴れ，曇り，雨とし，それぞれを表す確率を p_1, p_2, p_3 として確率ベクトル $p = [p_1,\ p_2,\ p_3]^\top$ を考える．現在の天気は晴れであるとし，次の確率行列で一日後の天気予報が与えられるとする．

   $$A = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{3}{8} \\ \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{3}{8} \end{bmatrix}$$

   このとき，n 日後の天気の確率を求めることは，べき乗法を行っていることと等価である．$p^{(0)} = p = [1, 0, 0]^\top$ とし，べき乗法により $p^{(5)}$ まで求め，A の絶対値最大の固有値を求めよ．途中計算は 10 進 3 桁以上で計算し，答えは 10 進 3 桁の浮動小数点数で表すこと．

   (c) (b) の問題設定の下で，5 日後に雨が降る確率を，10 進 2 桁の浮動小数点数で述べよ．

   (d) 次の確率行列は，初期ベクトルに固有ベクトルを選ばない限り，べき乗法で固有ベクトルを求められない．

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

   なぜ求められないか，理由を述べよ．

2. $a, b \in \mathbb{R},\ a < b$ とし，次の関数 $f : [a, b] \to [0, 1]$ を考える．

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

   このとき，この関数 f を多項式で近似したい．$p(x) := \sum_{n=0}^{n} \alpha_i x^i$ とし，次の関数を最小化する α_i を求めたい．

   $$\min_{\alpha_i \in \mathbb{R},\ i=0,1,2} \int_a^b |f(x) - p(x)|^2 dx$$

   以下の問いに答えよ．

(a) 単項式 $p_i(x) = x^i$, $i = 0, 1, \ldots, n$ を用いると，

$$p(x) = \begin{bmatrix} p_0(x) & p_1(x) & \ldots & p_n(x) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{bmatrix}$$

と定義できる．関数 g, h の内積を

$$\langle h, g \rangle := \int_a^b h(x)g(x)dx$$

で定めるとき，解くべき問題は次の連立一次方程式になることを示せ．

$$\begin{bmatrix} \langle p_0, p_0 \rangle & \langle p_0, p_1 \rangle & \ldots & \langle p_0, p_n \rangle \\ \langle p_1, p_0 \rangle & \langle p_1, p_1 \rangle & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ \langle p_n, p_0 \rangle & \ldots & & \langle p_n, p_n \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle p_0, f \rangle \\ \langle p_1, f \rangle \\ \vdots \\ \langle p_n, f \rangle \end{bmatrix}$$

(b) $a = 0$, $b = 1$ として，次の行列の要素を具体的に求めよ．

$$\begin{bmatrix} \langle p_0, p_0 \rangle & \langle p_0, p_1 \rangle & \ldots & \langle p_0, p_n \rangle \\ \langle p_1, p_0 \rangle & \langle p_1, p_1 \rangle & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ \langle p_n, p_0 \rangle & \ldots & & \langle p_n, p_n \rangle \end{bmatrix}$$

(c) (b) で得た行列を用いると，(a) の連立一次方程式は，n が大きいと解きにくくなる．この理由を述べ，改善法を挙げよ．

3. 比較的高次元の対称行列の固有値問題の解法として，直交行列を用いて三重対角化してから固有値問題を解く手法がある．

(a) 三重対角化の手法のうち，Householder 法あるいは Lanczos 法のどちらかを説明せよ．

(b) 次の行列 A を三重対角化せよ．

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 & 4 \\ 2 & -1 & 0 & -3 \\ 0 & 0 & 2 & -1 \\ 4 & -3 & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

計算結果は，10 進 2 桁の浮動小数点数で表すこと．

(c) 三重対角化してから固有値を求めるために，Jacobi 法を使うのは得策ではない．その理由を述べよ．

4. DKA 法について述べよ．

解答例

1. (a) 直接計算すればよい．

$$\sum_{j=1}^{n} y_j = \sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{n} A_{ji}x_i = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} A_{ji}x_i = \sum_{i=1}^{n}\left(\sum_{j=1}^{n} A_{ji}\right)x_i = \sum_{i=1}^{n} = x_i$$

   (b) 直接計算すると，

$$p^{(4)} = \begin{bmatrix} 0.3734 \\ 0.3449 \\ 0.2817 \end{bmatrix},\ p^{(5)} = \begin{bmatrix} 0.3721 \\ 0.3451 \\ 0.2828 \end{bmatrix}$$

   を得る．固有値の近似値は,

$$\frac{p^{(5)\top}p^{(5)}}{p^{(5)\top}p^{(4)}} \simeq 1$$

   となる．

   (c) $p^{(5)}$ の第三成分を見ればよい．降水確率は 29%である．

   (d) B の固有値は，± 1 である．ベキ乗法は絶対値最大の固有値を用いて，それ以外の固有値成分を小さくする手法である．しかし，B は固有値の絶対値が同じなので，反復を繰り返しても，いつまで経っても収束しない．

2. (a) 最小化すべき関数を整理すると，

$$\begin{aligned}\int_a^b |f(x)-p(x)|^2 dx =& \langle f-p, f-p\rangle \\ =& \langle f-\sum_{i=1}^{n}\alpha_i p_i, f-\sum_{i=1}^{n}\alpha_i p_i\rangle \\ =& \langle f,f\rangle - 2\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\langle f,p_i\rangle + \sum_{i,j=1}^{n}\alpha_i\alpha_j\langle p_i,p_j\rangle\end{aligned}$$

   となる．ここで

$$A := \begin{bmatrix} \langle p_0,p_0\rangle & \langle p_0,p_1\rangle & \dots & \langle p_0,p_n\rangle \\ \langle p_1,p_0\rangle & \langle p_1,p_1\rangle & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ \langle p_n,p_0\rangle & \dots & & \langle p_n,p_n\rangle \end{bmatrix},\ y := \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{bmatrix},\ b := \begin{bmatrix} \langle p_0,f\rangle \\ \langle p_1,f\rangle \\ \vdots \\ \langle p_n,f\rangle \end{bmatrix}$$

   とおくと，

$$\begin{aligned}\sum_{i,j=1}^{n}\alpha_i\alpha_j\langle p_i,p_j\rangle - 2\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\langle f,p_i\rangle =& y^\top Ay - 2y^\top b \\ =& (Ay-b)^\top A^{-1}(Ay-b) - b^\top A^{-1}b\end{aligned}$$

   より，パラメータ α_i（ベクトル y）を平方完成によりくくりだせる．ここで，A は正則であることに注意されたい．したがって，解くべき問題は

$$\min_{y\in\mathbb{R}^{n+1}} (Ay-b)^\top A^{-1}(Ay-b)$$

   となり，その最小値は $Ay=b$ の解である．

(b) 各要素は

$$\langle p_i, p_j \rangle = \int_0^1 x^{i+j} dx = \frac{1}{i+j+1}$$

であるので,

$$\begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \cdots & \frac{1}{n+1} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ \frac{1}{n+1} & \cdots & & \frac{1}{2n+1} \end{bmatrix}$$

(c) n を大きくしていくと，下から 2 行のベクトルの要素がほぼゼロになっていき，ベクトル同士の独立性が数値誤差により失われていく．したがって，解きにくい連立一次方程式になる．

これを解消するには，単項式を基底関数として展開するのではなく，例えば直交多項式を用いればよい．

3. (a) 省略.

(b) Householder 法を用いる．

$$x_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \\ 4 \end{bmatrix},\ y_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ \sqrt{2^2+4^2} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix},\ u_1 = \frac{x_1 - y_1}{\|x_1 - y_1\|}$$

とし，I を単位行列として

$$P_1 = I - 2u_1 u_1^\top$$

とおくと，10 進 4 桁の浮動小数点数で表現して

$$A^{(1)} = P_1 A P_1 \simeq \begin{bmatrix} 1 & 4.472 & 0 & 0 \\ 4.472 & -1.8 & -0.8944 & -2.6 \\ 0 & -0.89 & 2 & 0.4472 \\ 0 & -2.6 & 0.4472 & 1.8 \end{bmatrix}$$

となる．同様に

$$x_2 = \begin{bmatrix} 4.472 \\ -1.8 \\ -0.89 \\ -2.6 \end{bmatrix},\ y_2 = \begin{bmatrix} 4.472 \\ -1.8 \\ 2.750 \\ 0 \end{bmatrix},\ u_2 = \frac{x_2 - y_2}{\|x_2 - y_2\|}$$

とし，I を単位行列として

$$P_2 = I - 2u_2 u_2^\top$$

とおくと,

$$A^{(2)} = P_2 A^{(1)} P_2 \simeq \begin{bmatrix} 1 & 4.472 & 0 & 0 \\ 4.472 & -1.8 & 2.75 & 0 \\ 0 & 2.75 & 2 & 0.4141 \\ 0 & 0 & 0.4141 & 1.704 \end{bmatrix} \simeq \begin{bmatrix} 1 & 4.5 & 0 & 0 \\ 4.5 & -1.8 & 2.8 & 0 \\ 0 & 2.8 & 2 & 0.41 \\ 0 & 0 & 0.41 & 1.7 \end{bmatrix}$$

となる．

(c) Jacobi 法は，特定の非対角成分をゼロにする代わりに，ゼロの成分を非ゼロに変えてしまう．バイセクション法などの他の有効な手法に比べると，Jacobi 法は計算量が多くなるために数値誤差が溜まってしまう．そのため，積極的に Jacobi 法を使う理由はない．

4. 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 $\alpha_i,\ i = 1, 2, \cdots, n$ 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．初期値配置は，具体的には次のようになる．

$$z_i^{(0)} = -\frac{a_1}{a_0 n} + r_0 \exp\left(\sqrt{-1}\left(\frac{2(i-1)\pi}{n} + \frac{\pi}{2n}\right)\right), \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

ただし，r_0 は p_n の全ての根を含む円の半径である．