計算情報学 I

名古屋大学　情報文化学部
自然情報学科３年
第７回

鈴木泰博
情報文化学部・大学院情報科学研究科
複雑系科学専攻

Science of
interactions

問題別正答率

1-1 計算回数の数え上げ	40.7%
1-2 精度の評価	22.2%
2 ガウスの消去法	81.4%
3 LU分解	40.7%
4-1 ガウスの消去法のアルゴリズム	7.4%
4-2　計算量の評価	11.1%

Science of interactions

Agenda
計算情報学Ｉ 第７回

1. 逐次近似法(2分法）
2. 逐次代入法
3. ニュートン法
4. 解の収束について

方程式の根を求める数値計算手法

$$\boxed{f(x) = x^2 + 2x - 1 = 0}$$

↓

解の公式により求めることが可能。

でも。。

- 5次以上の多項式の場合は？
- 特殊関数が含まれる場合は？

…

↓

数値計算が必要となる。

Science of interactions

逐次近似法 〜2分法

解の候補となる空間を2分することで区間縮小を行い近似する方法

$x^2 = 11$ を満たすxを開平算を用いずに計算するには。。

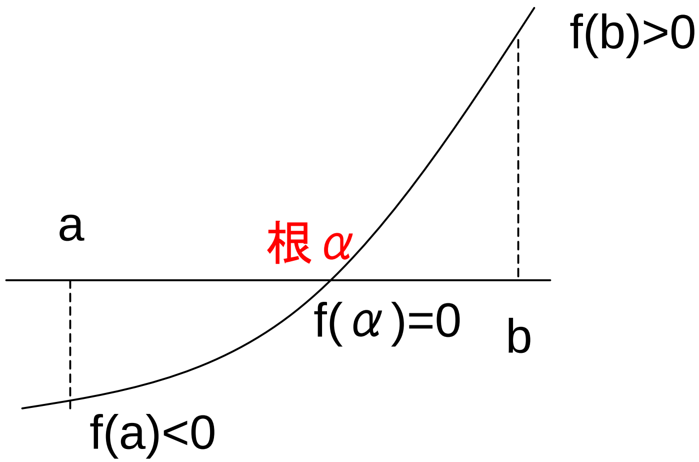
3^2=9, 4^2=16より、解は3と4の間にあると大よその見当をつける（第1近似）
そして、解の存在する区間を順次狭めていく（逐次近似）

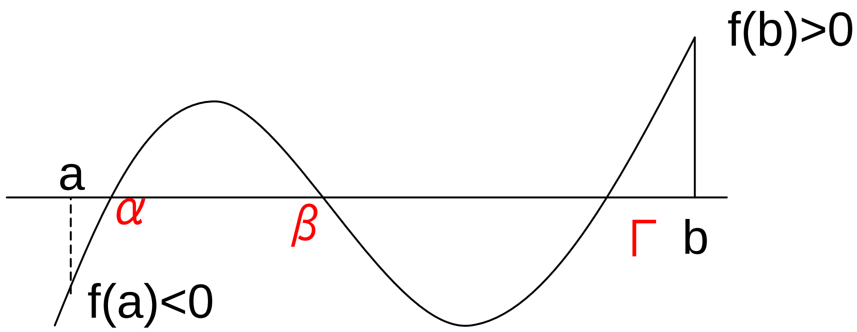
$$
\begin{array}{ccccccccccc}
3 & < & \alpha & < & 4 & \to & \dfrac{3+4}{2} & = & 3.5, & (3.5)^2 & = & 12.25 \\
3 & < & \alpha & < & 3.5 & \to & \dfrac{3+3.5}{2} & = & 3.25, & (3.25)^2 & = & 10.56\ldots \\
3.25 & < & \alpha & < & 3.5 & \to & \dfrac{3.25+3.5}{2} & = & 3.375, & (3.375)^2 & = & 11.39 \\
3.25 & < & \alpha & < & 3.375 & \to & \dfrac{3.25+3.375}{2} & = & 3.3125, & (3.3125)^2 & = & 10.97 \\
3.3125 & < & \alpha & < & 3.375 & \to & \ldots & & & & &
\end{array}
$$

Science of interactions

2分法の原理
～中間値の定理

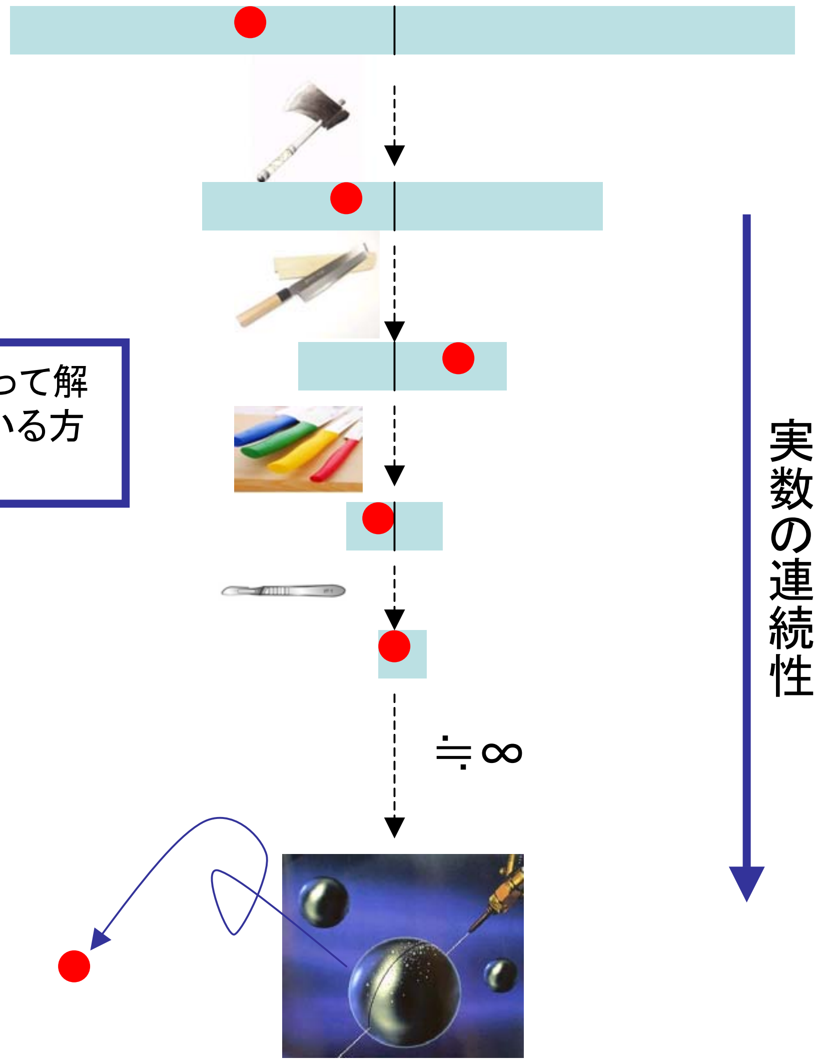
関数f(x)が区間a,b(a≠b)で連続なとき、もし、f(a)>0, f(b)<0なるa,bが存在すれば
f(α)=0となるような**根 α** がaとbの間に少なくとも1つは存在する。





中間値の定理の証明＝２分法の原理

証明のスケッチ



半分に切って解を含んでいる方を残す

実数の連続性

収束判定条件

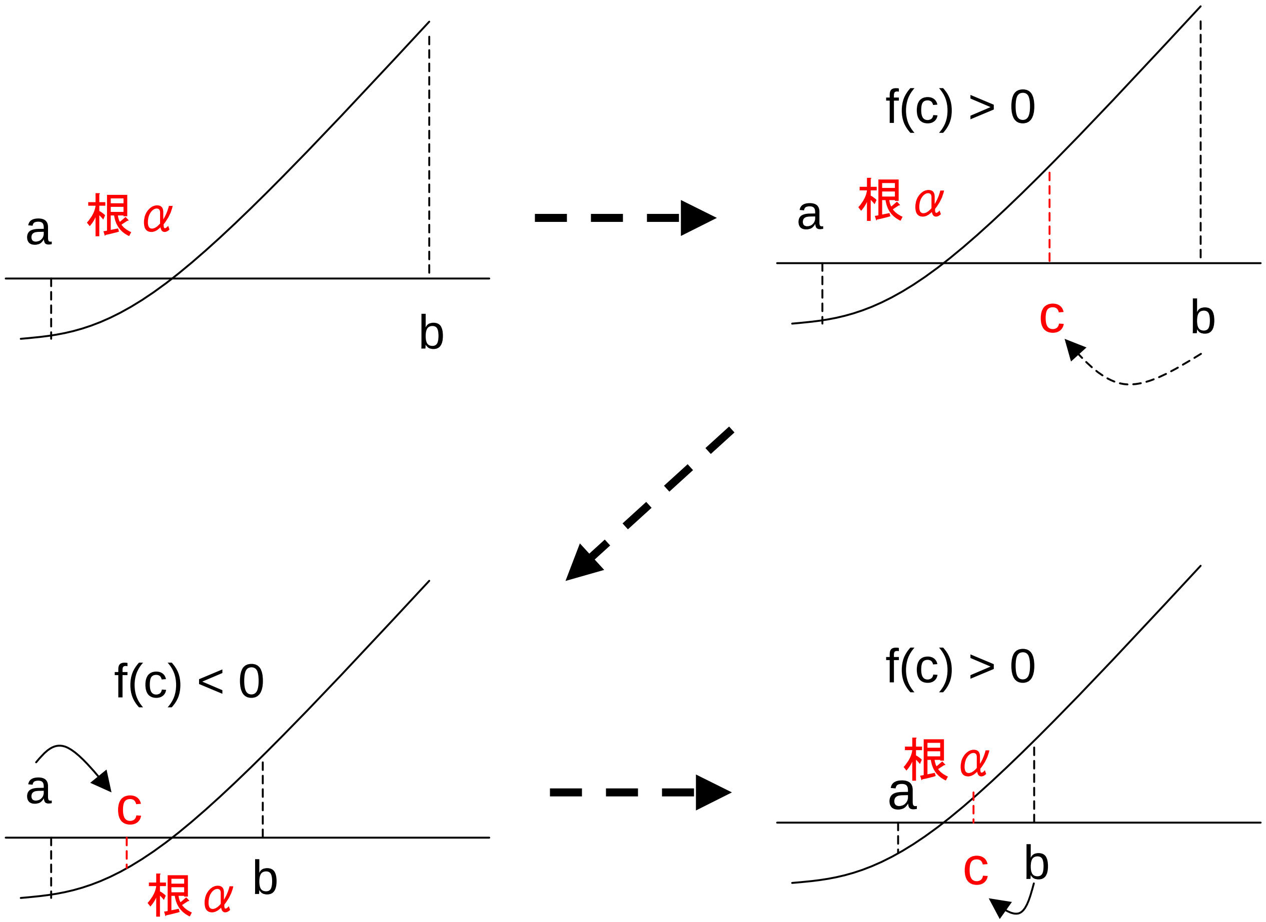
有限の縮小で解に到達できるかわからないので、以下の判定条件を用いる。

$$\frac{a-b}{2} < \varepsilon$$

この条件を満たしたら計算を止めてこの値を近似値とする。その場合、真の値との誤差は高々εとなる。

Science of interactions

2分法のアルゴリズム



Science of interactions

2分法のアルゴリズム

（1） f(a)<0, f(b)>0を満たすように変数a,bの値を設定する。

（2） 以下

c:=(a + b) / 2

|a – b| / 2 < ε ならばステップ(3)へ

fc:=f(c)

もし、

fc > 0 ならば b:=c

fc < 0ならば a:=c

fc = 0 ならばステップ(3)へ

を繰り返す

（3） c を答えとする

2分法の計算量

２分法で最も計算の手間がかかるのはf(c)の計算なので、その回数を見積もれば計算量が測れる。計算終了までに要する繰り返し回数は、収束条件を満たした場合はfcを計算しないので、条件を満たす１回前までをN回とすると、

$$\frac{a-b}{2^{N+1}} < \varepsilon$$

をみたす最小のNである。すなわち、

$$N > \log_2\left(\frac{|a-b|}{\varepsilon}\right) - 1$$

を満たす最小のNとなる。

Science of interactions

2分法の計算例

$$f(x) = e^{-x} - x^2 = 0$$

$$f(0) = 1 > 0$$

$$f(1) = -1 < 0$$

より、a=1, b=0 とおく

解を小数点以下5桁まで計算するため、$\varepsilon = 5.0 \times 10^{-6}$ とおく

$$\log_2\left(\frac{|a-b|}{\varepsilon}\right) - 1 = 16.609\ldots$$ **計算に必要な計算回数は17回**

演習　2分法をプログラミングし実際に17回で収束するか確認せよ。

ちなみに、17回目で0.7034683、18回目で0.7034645
($a - b = 3.8 \times 10^{-6}$より、$(a - b)/2 < \varepsilon$)

Science of interactions

逐次代入法
最も原始的な近似解法

f(x)をx = g(x)と変形した方程式を、$x_{k+1} = g(x_k)$ と逐次に代入することにより解く方法

$$\boxed{x = \cos x}$$

$x_1 = 1$ (rad)

$x_2 = \cos x_1 = \cos 1$

⋮

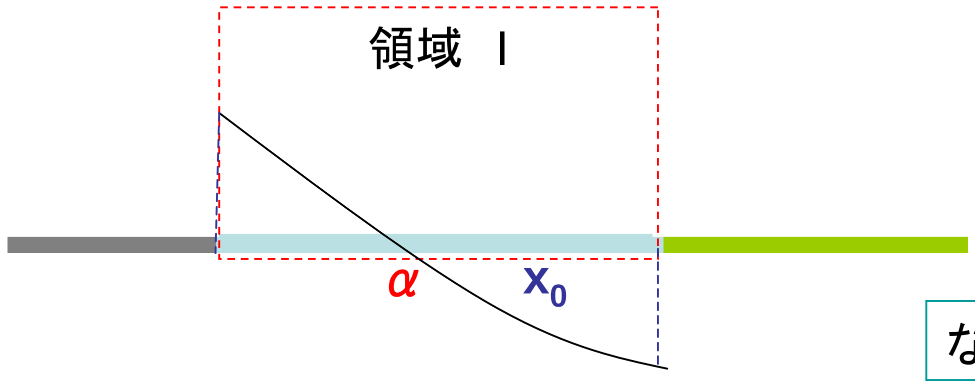
$x_{k+1} = \cos x_k$

なにしろ簡単なので昔から広く使われてきた。でも、収束が遅い。

演習：逐次代入法をプログラミングしこの問題をといてみよ。
50回ぐらいで 0.739085133が得られるはず。

逐次代入法の収束性

$f(x) = 0$ の解をαとし、領域Iを $| x - \alpha | < \varepsilon$ を満たす全ての点の集合とする。
いま、$f(x) = 0$を$x = g(x)$として逐次近似を行なう場合、$g(x)$, $g'(x)$がIで連続で、Iに含まれる全ての点に対し$|g'(x)| \leqq K < 1$となる正の定数kが存在し、初期近似値がIに選ばれていれば、解はαに収束する。



この領域内部では全ての点で $|g'(x)| < 1$

ならば解はαに収束

逐次代入法の原理

f(x) = 0　の解をαとし、領域Iを $|x-\alpha| < \varepsilon$ を満たす全ての点の集合とする。
いま、f(x) = 0をx = g(x)として逐次近似を行なう場合、g(x), g´(x)がIで連続で、Iに含まれる全ての点に対し$|g'(x)| \leqq K < 1$となる正の定数kが存在し、初期近似値がIに選ばれていれば、解はαに収束する。

証明のスケッチ

αは逐次代入

$x_{i+1} = g(x_i)$　①

の解であるから、$\alpha = g(\alpha)$であり、これを①から辺々ひくと、

$x_{i+1} - \alpha = g(x_i) - g(\alpha)$ ②

平均値の定理より、$g(x_i) - g(\alpha) = g'(\tau_i)(x_i - \alpha)$

i = 0 に対しては仮定より、τ_0がIに含まれ、$|g'(\tau_0)| < 1$である。

これと②より、

$|x_1 - \alpha| = |g'(\tau_0)| \cdot |x_0 - \alpha| \leqq |x_0 - \alpha|$

が成立し、x_iもまたIに含まれ、解により近い値となる。

k回目の反復計算での誤差$(x_k - \alpha)$をe_kとすれば、

$|e_{i+1}| = |g'(\tau_i)| \cdot |e_i| \leqq K|e_i|$, (i =0,1,…)となる。

よって、この式を繰り返し適用することにより、

$|e_{i+1}| \leqq K|e_i| \leqq K^2|e_{i-1}| \leqq \ldots \leqq K^{i+1}|e_0|$が得られる。

ここで K<1より、

$\lim k_{i+1} = 0$ ($i \to \infty$)よって　$\lim |e_{i+1}| = 0$ ($i \to \infty$)となる。

したがって、$\lim x_i = \alpha$ ($i \to \infty$)。

平均値の定理
f(x)を区間a,bで連続、かつ微分可能な関数とする。このとき、区間a,bに次の関係を満たすcが少なくとも1つ存在する。

$$f'(c) = \frac{f(b) - f(a)}{b - a}$$

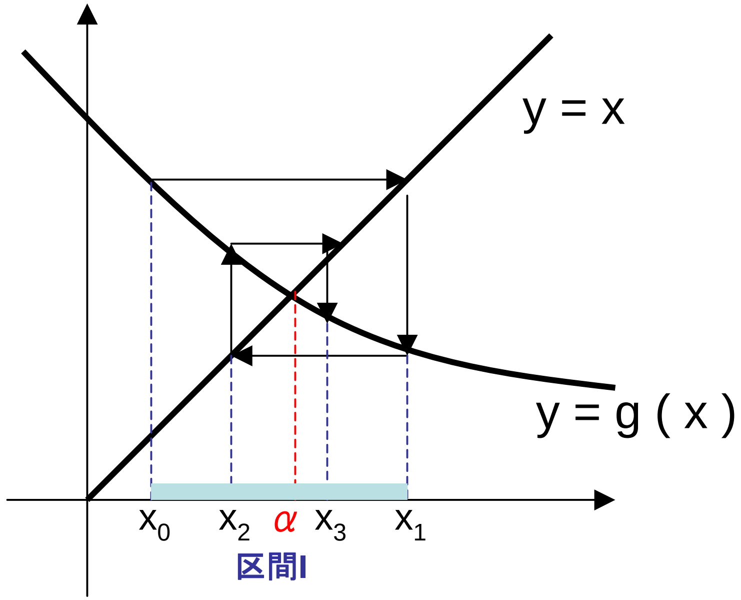
逐次代入法の原理

区間の縮小の程度を決める
だから解近傍での$g'(\tau)$が小さいほど
収束が早くなる。

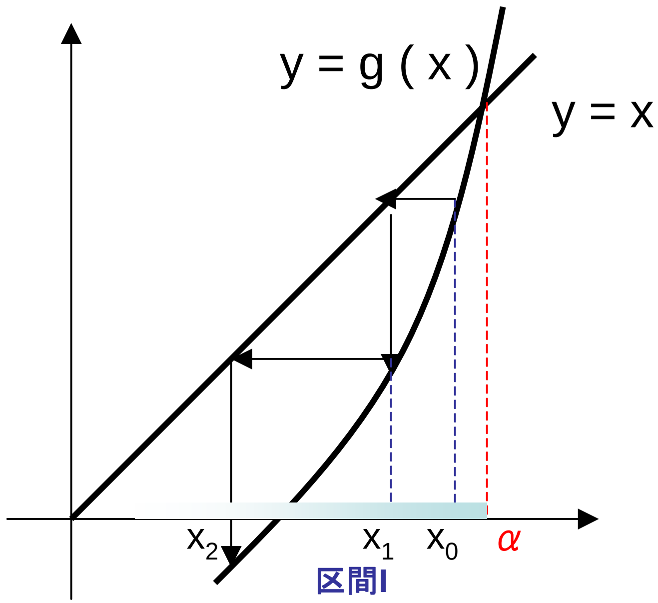
$|e_{i+1}|=|g'(\tau_i)|\cdot|e_i|\leqq K|e_i|$, (i =0,1,…)
より、
$|e_{i+1}|\leqq K|e_i|\leqq K^2|e_{i-1}|\leqq\dots\leqq K^{i+1}|e_0|$
K<1より、
$\lim k_{i+1}=0\ (i\to\infty)$, $\lim|e_{i+1}|=0\ (i\to\infty)$
⇒ $\lim x_i=\alpha\ (i\to\infty)$。

評価のために定数Kで変数$g'(\tau_i)$を上から押さえる

ここがポイント



収束する場合 $K=|g'(x)|<1$



発散する場合 $K=|g'(x)|>1$

収束の速さの評価

反復式　$x_{k+1} = \phi(x_k)$　①

の解（真の値）を$x_{真}$とする。また、第k近似解x_kの誤差を$e_k = x_k - x_{真}$　つまり、$x_k = x_{真} + e_k$

①より、$x_{k+1} = \phi(x_{真} + e_k)$。これをテイラー展開すると、

$$x_{k+1} = \Phi(x_{真}) + \Phi'(x_{真})e_k + \frac{\Phi''(x_{真})}{2} e_k^{\ 2}$$

$\phi(x_{真}) = x_{真}$、かつ、$x_{k+1} = x_{真} + e_{k+1}$より、

誤差の評価

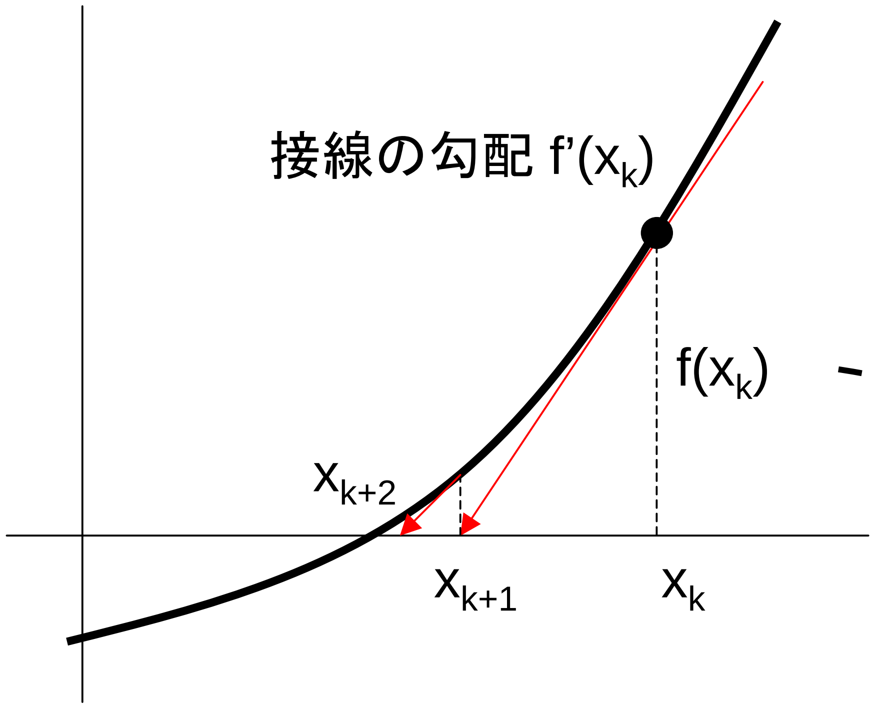
$$e_{k+1} = \Phi'(x_{真})e_k + O(e_k^2)$$
$$\cong \boxed{Ce_k}$$

$|f(x_{真})|$が
>1 … 発散
<1 … 収束
この値に収束の速度が依存

「1次収束」、もしくは、「収束次数が1」である

ニュートン法

- きわめてシンプルだが、収束が早く実用的
- 他のより複雑な手法と比べてもさほど遜色がない
- 唯一の難点はf’’(x)の計算が必要なこと



初期値を適当に選ぶ

k = 0,1,2,...,の順に

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

収束判定

$$f'(x_k) = \frac{f(x_k)}{x_k - x_{k+1}}$$ より。

Science of interactions

演習

与えられた数aの平方根をニュートン法で解く場合の反復式を求めよ。

Science of
interactions

解答

与えられた数aの平方根をニュートン法で解く場合の反復式を求めよ。

$$x^2 - a = 0$$

$$f(x) = x^2 - a$$

$$f'(x) = 2x$$ より、

$$x_{k+1} = x_k - \frac{(x_k^{\ 2} - a)}{2x_k} = \frac{x_k + \dfrac{a}{x_k}}{2}$$

この反復式を用いることで、繰り返し回数は1回から2回になる。

収束の速さの評価

反復式　$x_{k+1} = \phi(x_k)$　①
の解（真の値）を$x_{真}$とする。また、第k近似解x_kの誤差を$e_k = x_k - x_{真}$　つまり、$x_k = x_{真} + e_k$

①より、$x_{k+1} = \phi(x_{真} + e_k)$。これをテイラー展開すると、

$|f(x_{真})|$が
>1 … 発散
<1 … 収束
この値に収束の速度が依存

$$e_{k+1} = \Phi'(x_{真})e_k + \frac{\Phi''(x_{真})}{2}e_k{}^2 + \ldots$$

$f(x_{真})=x_{真}$、かつ、$x_{k+1} = x_{真} + e_{k+1}$より、

$$e_{k+1} = \Phi'(x_{真})e_k + \frac{\Phi''(x_{真})}{2}e_k{}^2 + \ldots$$

$$\boxed{\Phi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)} \Rightarrow \Phi'(x) = 1 - \frac{\{f'(x)\}^2 - f(x)f''(x)}{\{f'(x)\}^2}}$$ より、$\phi'(x_{真})=0$

$$e_{k+1} \cong Ce_k^2 + O(e_k^3)$$

「2次収束」

Science of interactions

（数値）解析的な背景

これまで紹介してきた反復法には次のような解析的な背景がある。

定理1　閉区間 I から I への関数 g(x)が $x, y \in I$ ならば、

$$|g(x)-g(y)| \le L|x-y|, (0 \le L < 1)$$

を満たすならば、gは I 内にただ一つの解 α を持ち、$x_{n+1} = g(x_n)$は α に収束する。
（このようなgは縮小写像 contractive mappingと呼ばれる）。
注)一般にこのような条件を満たすとき、gは**リプシッツ(Lipschitz)条件**を満たすといい、Lを**リプシッツ定数**をいう。

証明　解の存在と収束性の証明については、中間値の定理を用いた収束性の証明と同様であるので省略する。
解の唯一性の証明は、もし α 以外に解 β，β =g(β)があったと仮定すると、

$$|\beta-\alpha| = |g(\beta)-g(\alpha)| \le L|\beta-\alpha|$$

より、L＝１となり条件に矛盾することにより得られる。

縮小写像の原理を応用するポイントは**リプシッツ定数L＜1**である！

Science of interactions