数値計算

大阪大学基礎工学部

永原正章

2012年4月12日

この授業の目的

建築物の耐震解析や大気変動などのシミュレーション,株価変動の予測など, 工学や自然科学,経済・社会科学のさまざまな場面で**数値計算は重要な役割を果たします**. この授業では,2分法やNewton 法などに代表される反復法を基礎として, 数値計算アルゴリズムとその収束性,誤差解析等について勉強します.

到達目標

1. 世の中に多く存在する数値計算ソフトウェアを「ブラックボックス」と見るのではなく, その背後にあるアルゴリズムや収束性についての知識を得ることにより, 出てきた答えの妥当性を議論できるようになる.
2. 誤差についての解析法を知ることにより, 例えば円周率を「3」として計算した結果の信頼性を見積ることができる.
3. 先人たちが発見した秀逸な数値計算アルゴリズムの数々を学ぶことにより, 新しいアイデアを生み出す力を身に付けることができる.

講義テキストについて⋆⋆⋆

下記ページよりダウンロードしてください．

http://www-ics.acs.i.kyoto-u.ac.jp/~nagahara/nc.html

講義内容

1. 厳密解と近似解,誤差について
2. 非線形方程式の反復解法と収束性
   1. 反復法入門
   2. 非線形方程式の数値解法アルゴリズム(2分法,Newton 法など)
   3. 不動点定理による収束性の解析
3. 多変数方程式の反復解法と収束性
   1. 多変数 Newton 法
   2. 不動点定理
   3. 線形連立方程式の数値解法アルゴリズム
4. 行列の固有値と特異値の数値計算
5. 関数の補間と数値積分
   1. 多項式補間
   2. 数値積分法
6. 逆問題の解法
   1. 最小二乗法
   2. 正則化法
   3. 圧縮センシング入門

講義の進め方と成績評価

- スライドによる講義+練習問題
- 成績:筆記試験80%,出席点20%の配分で成績を評価
    - 筆記試験で75点以上取れば,出席回数0でも合格できる.
    - 全て出席すれば,筆記試験で50点しか取れなくても「可」で合格できる.
    - 講義に出て,しっかり勉強すれば,力が付くのは言うまでもない.
- 欠席する場合,特に「欠席届」等は必要ない.

数値計算とコンピュータ

数値計算＝コンピュータを使った計算

- プログラミングが必要
  - C言語, FORTRAN, PYTHON, etc.
- 数値計算用ソフトウェアを使えば簡単
  - MATLAB, Mathematica, etc（有料）
  - Scilab, Octave, etc（無料）

数値計算用ソフトウェア Scilab

- INRIA (Institute National de Recherche en Informatique et Automatique; フランス国立情報学自動制御研究所) で開発
- フリーウェア
- http://www.scilab.org/

Scilabによる数値計算(非線形方程式)

実数 $a > 0$ が与えられたとき,$\sqrt{a}$ の近似値を求めたい.
例えば,$\sqrt{123}$ の近似値は?

$\sqrt{a}$ は次の方程式の解:

$$x^2 = a, \quad x > 0.$$

方程式 $x^2 - a = 0$ の近似解を求めよ.

$\sqrt{a}$ を求めるNewton法

初期値 $x[0] > 0$ を適当に与えて,次の計算を繰り返す.

$$x[n+1] = \frac{1}{2}\left(x[n] + \frac{a}{x[n]}\right), \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Scilab プログラム

```
a=123;
x=a;
N=1000;

for n=1:N
  x_next = 0.5*(x+a/x);
  x = x_next;
end

disp(x)
```

Scilabによる数値計算(連立方程式)

100元の連立一次方程式

$$Ax = b, \quad A \in \mathbb{R}^{100\times 100}, \quad x, b \in \mathbb{R}^{100}$$

を解け.

- 原理的には,(手作業で)厳密解が求まる.
- しかし,途方もない時間がかかる.
- 厳密解に十分近い近似解をコンピュータで求める.

連立一次方程式の近似解を求めるJacobi法

初期ベクトル $x[0]$ を適当に与えて,次の計算を繰り返す.

$$x[n+1] = x[n] - r^{-1}A^\top(Ax[n] - b), \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

ただし, $r = \|A\|^2 = \lambda_{\max}(A^\top A)$.

Jacobi法のScilabプログラム

$$x[n+1] = x[n] - r^{-1}A^{\top}(Ax[n] - b), \quad r = \lambda_{\max}(A^{\top}A)^{-1}$$

```
n=100;
rand("seed",1); A=rand(n,n);
rand("seed",2); b=rand(n);
r=1/max(spec(A'*A));
x=zeros(n,1);
for n=1:100000
  x_next = x - r*A'*(A*x-b);
  x = x_next;
end
disp(norm(A*x-b));
```

積分の計算

実数 $x > 0$ が与えられたとき,次の積分値を求めよ(Gauss 誤差関数).

$$\mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$$

厳密解

$$\mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{2n+1}}{n!(2n+1)}$$

近似解

$$\widetilde{\mathrm{erf}}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{N} \frac{(-1)^n x^{2n+1}}{n!(2n+1)}, \quad N: 有限$$

数値計算とは

厳密解を求めることが不可能な(または難しい)問題に対して,近似解を

- 精度よく
- 速く

求める方法

数値計算と誤差⋆⋆⋆

- 数値計算には,誤差がつきもの.
- 誤差とは?
- 実験や計測において

$$\text{誤差} = \text{真値} - \text{測定値}$$

系統誤差: 測定機器の不備や測定者の過失,未熟さなどに伴う人為的な誤差.

偶然誤差: いかに熟練者でも制御しえない偶然的に発生する誤差.

系統誤差と偶然誤差⋆⋆⋆

系統誤差 (systematic error) ：測定機器をより高精度なものにしたり,測定者を訓練することにより 抑えることができる.

偶然誤差 (random error) ：測定回数を増やすことにより改善される.（何度か測定を繰り返し,その測定値の平均をとる←中心極限定理）

数値計算における系統誤差

- プログラムのバグによる誤差
- アルゴリズムの間違いや不安定なアルゴリズムを使用したことによる誤差
- 反復法の初期値設定のミスによる誤差
- 数値を有限桁に丸めたり,操作を有限回で打ち切ったりしたときに生じる誤差(数値誤差)

練習問題

数値計算に偶然誤差は存在するか?

<u>ヒント</u>

- 偶然誤差＝「いかに熟練者でも制御しえない偶然的に発生する誤差」
- 確率的な誤差
- 数値計算(コンピュータによる計算)において,確率的な事象とは何か?