数値計算

大阪大学基礎工学部

永原正章

2012年4月26日(5限)

休講のお知らせ$\star\star\star$

下記の2回休講します(補講の日程は未定):

- 6月21日(木)
- 7月12日(木)

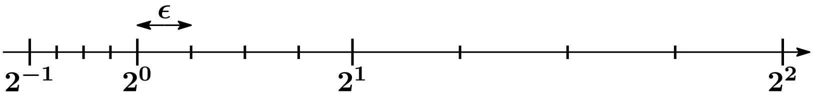
数値誤差

1. 実数値を有限桁の数で近似する際に発生する丸め誤差
2. 極限操作や無限個の数の和などを有限で近似する際に発生する打切り誤差

1 は数値の近似に関する誤差,2 は操作の近似に関する誤差.

丸め誤差

数値の丸め ($p = 3$ の場合).ϵ はマシンイプシロン.



- 数直線上の任意の点は,最も近い格子点の数値で近似される(丸められる).
- 量子化とも呼ぶ
- マシンイプシロン: $1 + \epsilon = 1$ となる数.単精度の場合,

$$\epsilon = 2^{-24+1} \approx 1.192 \times 10^{-7}$$

- `Scilab` では `%eps` でマシンイプシロンが定義されている.

丸め誤差の見積もり

- $\mathsf{m} \le |\mathsf{x}| \le \mathsf{M}$ である実数 x を考える.
- この x に対して,浮動小数点数に丸めた数を $\tilde{\mathsf{x}}$ とおくと,

$$\tilde{\mathsf{x}} = \mathsf{x}(1+\delta), \quad |\delta| \le \frac{\epsilon}{2}$$

- これを用いれば丸め誤差は

$$|\tilde{\mathsf{x}} - \mathsf{x}| = |\delta \mathsf{x}| \le \frac{\epsilon}{2} \cdot |\mathsf{x}|$$

- $\epsilon/2$ を丸めの単位と呼ぶ.
- 上の式の両辺を $|\mathsf{x}|$ で割ると

$$\left| \frac{\tilde{\mathsf{x}} - \mathsf{x}}{\mathsf{x}} \right| \le \frac{\epsilon}{2}$$

- この式の左辺を相対誤差と呼ぶ.
- 丸めの相対誤差 $\le$ 丸めの単位 $=$ マシンイプシロン$/2$.

桁落ち

- 非常に近い数どうしの引算で有効桁数が損失:桁落ち
- $\mathbf{1.23456 - 1.23455 = 0.00001 = 1 \times 10^{-5}}$
  - 有効数字6桁→1桁
- たとえば $1 - \cos x$ は x が小さいときは,$\cos x \approx 1$ となり桁落ちが生じる恐れがあるので,次のように計算:

$$1 - \cos x = 2\sin^2\left(\frac{x}{2}\right)$$

情報落ち

- 非常に大きな数と非常に小さな数の足し算
  - → 結果はほとんど変化しない(情報落ち)
- 有効数字が3桁の計算機を考える.
  - 1.00×10^3 と 1.00×10^{-3} を足し合わせると,

$$
\begin{aligned}
1.00 \times 10^3 + 1.00 \times 10^{-3} &= 1000 + 0.001 \\
&= 1000.001 \\
&= 1.000001 \times 10^3
\end{aligned}
$$

  - 計算結果を3桁に丸めると 1.00×10^3 → 計算結果に変化なし
- Napier の数の近似値

情報落ち

- Napier の数の近似値

$$e \approx \sum_{n=0}^{N} \frac{1}{n!} = 1 + 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{6} + \frac{1}{24} + \cdots + \frac{1}{N!}$$

- $n = 0, 1, 2, \ldots, N$ の順番で計算する
  - 大きな n で情報落ちの可能性
- $n = N, N-1, \ldots, 1, 0$ の順番で計算する
  - 情報落ちは起きない

浮動小数点数の演算における丸め誤差

- 半径 $1/3$ の円の面積 S を求める.
  - 厳密解

$$\mathrm{S} = \pi \times \left(\frac{1}{3}\right)^2 = \frac{\pi}{9} = 0.34906585\ldots$$

  - 近似解(有効数字1桁)

$$\widetilde{\mathrm{S}} = 3 \times (0.3)^2 = 0.27 \to 0.3$$

浮動小数点数の演算における丸め誤差

- 半径 $1/3$ の円の面積 S を求める.
  - 厳密解

$$\mathsf{S} = \pi \times \left(\frac{1}{3}\right)^2 = \frac{\pi}{9} = 0.34906585\ldots$$

  - 近似解(有効数字1桁)

$$\widetilde{\mathsf{S}} = 3 \times (0.3)^2 = 0.27 \to 0.3$$

- 第一の誤差: $|0.34906585\ldots - 0.27| = 0.0790659\ldots$

浮動小数点数の演算における丸め誤差

- 半径 $1/3$ の円の面積 S を求める.
  - 厳密解

$$\mathrm{S} = \pi \times \left(\frac{1}{3}\right)^2 = \frac{\pi}{9} = 0.34906585\ldots$$

  - 近似解(有効数字1桁)

$$\widetilde{\mathrm{S}} = 3 \times (0.3)^2 = 0.27 \to 0.3$$

- 第一の誤差: $|0.34906585\ldots - 0.27| = 0.0790659\ldots$
- 第二の誤差: $|0.27 - 0.3| = 0.03$(発生誤差)

浮動小数点数の演算における丸め誤差

- 半径 $1/3$ の円の面積 S を求める.
  - 厳密解

$$\mathsf{S} = \pi \times \left(\frac{1}{3}\right)^2 = \frac{\pi}{9} = 0.34906585\ldots$$

  - 近似解(有効数字1桁)

$$\widetilde{\mathsf{S}} = 3 \times (0.3)^2 = 0.27 \rightarrow 0.3$$

- 第一の誤差: $|0.34906585\ldots - 0.27| = 0.0790659\ldots$
- 第二の誤差: $|0.27 - 0.3| = 0.03$(発生誤差)
- 全体の誤差: $\leq$ 第一の誤差 $+$ 第二の誤差 $= 0.109\ldots$

打切り誤差

- コンピュータで計算するために,微分や積分などの極限操作を離散化したり, 無限個の数の和を有限回で打ち切ったりしたときに生じる誤差.
- 微分: 極限操作を含む.

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

- コンピュータで計算するには,十分小さい正の数 h をとり,

$$\delta_h f(x) := \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

  - h: ステップ幅,$\delta_h f(x)$: $f'(x)$ の中心差分近似

中心差分近似の打ち切り誤差

- 打切り誤差: $\varepsilon_0 = \delta_h f(x) - f'(x)$
- $f(x)$ をTaylor 展開:

$$f(x \pm h) = f(x) \pm hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) \pm \frac{h^3}{6}f'''(\theta_\pm)$$

  - $\theta_+ \in (x, x+h)$, $\theta_- \in (x-h, x)$
- これより

$$\begin{aligned}\delta_h f(x) &= \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \\ &= f'(x) + \frac{h^2}{12}f'''(\theta_+) + \frac{h^2}{12}f'''(\theta_-)\end{aligned}$$

$$\therefore \varepsilon_0 = \delta_h f(x) - f'(x) = \frac{h^2}{12}\left(f'''(\theta_+) + f'''(\theta_-)\right)$$

丸め誤差と打切り誤差

- 丸め誤差が存在しないときの打切り誤差

$$\varepsilon_0 = \frac{h^2}{12}\left(f'''(\theta_+) + f'''(\theta_-)\right)$$

- 丸め誤差が存在しないときは,$\varepsilon_0 \to 0$ $(h \to 0)$
- 丸め誤差が存在するとき
  - h を小さくしすぎると,丸め誤差の影響が大きくなり,誤差は拡大する.
  - 適切なステップ幅 h を設定する必要がある.

反復法

- 反復法：簡単には解けない難しい問題を,単純な問題の繰り返しで解く(近似解を求める)方法.

反復法の定式化

- ある集合 X 上の写像 ϕ と初期値 $x_0 \in X$ を与えて

$$x[n+1] = \phi(x[n]), \quad n = 0, 1, 2, \ldots, \quad x[0] = x_0$$

により漸近的に厳密解に収束させる.
  - 集合 X: 実軸上の閉区間や $\mathbb{R}^N$ における単位球,$N \times N$ の対称行列全体など.

- 厳密解 x^* は集合 X 内に存在すると仮定する.
- 関数 ϕ をうまく選ぶと, $\lim_{n\to\infty} x[n] = x^*$.
- 収束の速さも関数 ϕ の選び方に依存する.

$\sqrt{a}$を求める反復法$\star\star\star$

- $a > 0$ が与えられたとき,$\sqrt{a}$ の近似値を求めたい.
- $\sqrt{a}$ は方程式 $x^2 = a$ の厳密解.
- $x > 0$ の範囲で考えると

$$
\begin{aligned}
& x^2 = a \\
& \Leftrightarrow x = \frac{a}{x} \\
& \Leftrightarrow 2x = x + \frac{a}{x} \\
& \Leftrightarrow x = \frac{1}{2}\left(x + \frac{a}{x}\right) = \phi(x)
\end{aligned}
$$

$\sqrt{a}$を求める反復法$\star\star\star$

- 実数 $a > 0$ に対して,$\sqrt{a}$ の近似値を求める反復法は以下で与えられる:

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

- この反復法がある値 $x^* \in [0, \infty)$ に収束したとすると

$$x^* = \phi(x^*) = \frac{1}{2}\left(x^* + \frac{a}{x^*}\right)$$

これより $x^* = \sqrt{a}$.

- 上の反復法は収束すればそれは $\sqrt{a}$ となる.

練習問題

Newton 法を使って,$\sqrt{a}$ の近似値を $x[3]$まで求め,真値と比較せよ. ただし,a の値は,自分の学籍番号の末尾に従って,下記のように設定し, Newton 法の初期値は $x[0] = a$ とせよ.

末尾$=$ 0 or 2 $\rightarrow a = 2 \quad (\sqrt{2} = 1.41421356\ldots)$

末尾$=$ 1 or 3 $\rightarrow a = 3 \quad (\sqrt{3} = 1.73205081\ldots)$

末尾$=$ 4 or 5 $\rightarrow a = 5 \quad (\sqrt{5} = 2.23606798\ldots)$

末尾$=$ 6 or 7 $\rightarrow a = 6 \quad (\sqrt{6} = 2.44948974\ldots)$

末尾$=$ 8 or 9 $\rightarrow a = 7 \quad (\sqrt{7} = 2.64575131\ldots)$

$\mathsf{a} = 7$ の場合の解答例

初期値を $\mathsf{x}[0] = 7$ とし,Newton 法により,近似値 $\mathsf{x}[3]$ を求める:

$$\mathsf{x}[1] = \frac{1}{2}\left(\mathsf{x}[0] + \frac{\mathsf{a}}{\mathsf{x}[0]}\right) = \frac{1}{2}\left(7 + \frac{7}{7}\right) = 4$$

$$\mathsf{x}[2] = \frac{1}{2}\left(\mathsf{x}[1] + \frac{\mathsf{a}}{\mathsf{x}[1]}\right) = \frac{1}{2}\left(4 + \frac{7}{4}\right) = 2.875$$

$$\mathsf{x}[3] = \frac{1}{2}\left(\mathsf{x}[2] + \frac{\mathsf{a}}{\mathsf{x}[2]}\right) = \frac{1}{2}\left(2.875 + \frac{7}{2.875}\right) = 2.655\ldots$$

真値は,$\sqrt{7} = 2.64575131\ldots$ であるので,その差は

$$|2.64575131\ldots - 2.655\ldots| = 0.0092\ldots \leq 0.01$$

となる.すなわち,近似値 $\mathsf{x}[3]$ は小数点以下第2位まで正しい.

反復法における基本問題

- 反復法は厳密解に収束するのか?
- 収束するとして,その速さは?
- 反復法を有限回で打ち切ったときの誤差は?