数値計算

大阪大学基礎工学部

永原正章

2012年5月31日(5限)

休講と補講のお知らせ$\star\star\star$

下記の2回休講します.

- 6月21日(木)
- 7月12日(木)

講義室の変更および補講:

- 6月14日(木)$\longrightarrow$ 5限 (B102)・6限 (B102)
- 7月5日(木)$\longrightarrow$ 5限 (B102)・6限 (B102)

反復法の収束性解析と誤差解析

- 非線形方程式

$$f(x) = 0$$

- $x = \phi(x)$ の形に等価変形
- 反復法

$$x[n+1] = \phi(x[n]), \quad n = 0, 1, 2, \ldots, \quad x[0] \in K \subset \mathbb{R}^N$$

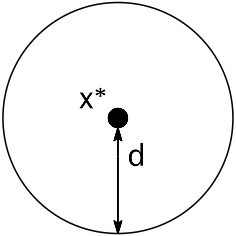
ただし,K は $\mathbb{R}^N$ の閉部分集合.

- 反復法の収束性: ϕ が K における縮小写像であれば, 任意の初期値$x[0]$に対して,上の反復法は厳密解に収束する.

不動点近傍での収束条件

- 縮小写像の2つの条件
  1. $\forall x \in K,\ \phi(x) \in K$
  2. $\exists q \in [0,1),\ \forall x, y \in K,\ \|\phi(x) - \phi(y)\| \leq q\|x - y\|$
- 領域 K に ϕ の不動点 x^* (すなわち,$x = \phi(x)$ の厳密解)が含まれているならば, [1]の条件は不要.
- 不動点 x^*の近傍$B(x^*, d)$での収束条件を考える

$B(x^*, d)$: 中心x^*,半径 $d > 0$ の閉球



不動点近傍での収束条件1

以下を仮定する.

- $\phi : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$
- x^*: ϕの不動点(すなわち,$x = \phi(x)$ の厳密解)
- $K \subset \mathbb{R}^N$: x^* を中心とする半径 $d > 0$ の閉球
$$K = B(x^*, d) = \{x \in \mathbb{R}^N : \|x - x^*\| \leq d\} \subset \mathbb{R}^N$$
- ある $q \in [0, 1)$ が存在して,任意の $y, z \in K$ に対して,
$$\|\phi(y) - \phi(z)\| \leq q\|y - z\|$$

このとき,x^* は K 内の唯一つの不動点であり,$x[0] \in K$ を初期値とする反復法

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

によって生成されるベクトル列 $\{x[n]\}$ に対して

$$\lim_{n\to\infty} x[n] = x^*$$

定理の証明

- 任意の $x \in K$ に対して

$$\phi(x) \in K = B(x^*, d) = \{x \in \mathbb{R}^N : \|x - x^*\| \leq d\}$$

を示せばよい.

- 実際,$x^* = \phi(x^*)$ と Lipschitz 条件

$$\|\phi(y) - \phi(z)\| \leq q\|y - z\|$$

を用いれば

$$\|\phi(x) - x^*\| = \|\phi(x) - \phi(x^*)\| \leq q\|x - x^*\| \leq qd < d$$

- ゆえに $\phi(x) \in K$ であることがわかる.
- 不動点定理より,定理が成り立つことがわかる.

ϕ が微分可能である場合

写像 $\phi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ の不動点を x^* とし,K を閉区間

$$K = [x^* - d, x^* + d], \quad d > 0$$

とする. さらに ϕ は次の条件を満たすとする.

1. ϕ は K 上で C^1 級
2. ある $q \in [0, 1)$ が存在して,任意の $x \in K$ に対して,

$$|\phi'(x)| \leq q.$$

このとき,x^* は K 内の唯一つの不動点であり,$x[0] \in K$ を初期値とする反復法

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

によって生成されるベクトル列 $\{x[n]\}$ に対して

$$\lim_{n \to \infty} x[n] = x^*$$

が成り立つ.

Newton 法$\star\star\star$

- 1変数の非線形方程式 $f(x) = 0$ に対する Newton 法

$$x[n+1] = x[n] - \frac{f(x[n])}{f'(x[n])}, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

  - x^*: 方程式 $f(x) = 0$ の解
  - K: x^* を含む閉区間
  - f は C^2 級かつ任意の $x \in K$ に対して $f'(x) \neq 0$

  と仮定する.
- 写像

$$\phi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}, \quad x \in K.$$

  関数 f に対する仮定より,K上で

$$x = \phi(x) \Leftrightarrow f(x) = 0$$

$\sqrt{a}$ を求めるNewton 法$\star\star\star$

- $a > 0$ として,$\sqrt{a}$ を求める数値計算を考える.
- 次の方程式の近似解を求める.

$$f(x) = x^2 - a = 0$$

- $f'(x) = 2x$
- Newton 反復法

$$\begin{aligned} x[n+1] &= x[n] - \frac{f(x[n])}{f'(x[n])} \\ &= x[n] - \frac{x[n]^2 - a}{2x[n]} \\ &= \frac{1}{2}x[n] + \frac{a}{2x[n]} \end{aligned}$$

$\sqrt{a}$ を求めるNewton 法(収束性)

- Newton 反復法

$$x[n+1] = \frac{1}{2}x[n] + \frac{a}{2x[n]} = \phi(x[n])$$

- 写像 ϕ と微分 ϕ'

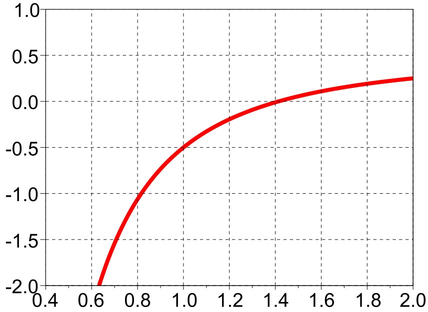
$$\phi(x) = \frac{1}{2}x + \frac{a}{2x}, \qquad \phi'(x) = \frac{1}{2} - \frac{a}{2x^2}$$

- $|\phi'(X)| < 1$ となる区間を見つける

$\sqrt{a}$ を求めるNewton 法(収束性)

$$\phi'(x) = \frac{1}{2} - \frac{a}{2x^2}$$

$a = 2$の場合の$\phi'(x)$のグラフ



$\sqrt{a}$ を求めるNewton 法(収束性)

$$\phi'(x) = \frac{1}{2} - \frac{a}{2x^2}$$

- $x > \sqrt{a}$ のとき
$$0 < \phi'(x) < \frac{1}{2}$$
- $\sqrt{\frac{a}{2}} \leq x \leq \sqrt{a}$ のとき
$$-\frac{1}{2} \leq -\phi'(x) \leq 0$$
- 以上より,任意の $x \in K := \left[\sqrt{\frac{a}{2}}, \infty\right)$ に対して,
$$|\phi'(x)| \leq \frac{1}{2} < 1$$

$\sqrt{a}$ を求めるNewton 法(収束性)

- さらに任意の $x \in K$ に対して,

$$\phi(x) = \frac{1}{2}\left(x + \frac{a}{x}\right) \geq \sqrt{x \cdot \frac{a}{x}} = \sqrt{a} > \sqrt{\frac{a}{2}}$$

  - 相加平均と相乗平均の不等式
- 上の式より,任意の $x \in K$ に対して $\phi(x) \in K$.
- 以上より,$\phi(x)$ は K 上の縮小写像である.
- 不動点定理より, 初期値を $\sqrt{\frac{a}{2}}$ 以上,例えば $x[0] = a$ とすれば, Newton 法によって生成される数列 $\{x[n]\}$ は $\sqrt{a}$ に収束する.

Newton 法の収束条件

以下を仮定する:

- x^*: 方程式 $f(x) = 0$ の解
- K: x^* を含む閉区間 $[x^* - d, x^* + d] (d > 0)$
- K上でfはC^2級かつ$f' \neq 0$
- ある $q \in [0, 1)$ が存在して,任意の $x \in K$ に対して

$$\left| \frac{f(x)f''(x)}{f'(x)^2} \right| \leq q$$

このとき,任意の初期値 $x[0] \in K$ から出発するNewton反復法

$$x[n+1] = x[n] - \frac{f(x[n])}{f'(x[n])}, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

は方程式 $f(x) = 0$ の解 x^* に収束する.

Newton 法の収束の速さについて

- $f(x) = 0$に対するNewton 法

$$x[n+1] = x[n] - \frac{f(x[n])}{f'(x[n])}, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

が収束すると仮定して,その収束の速さを考察する.

  - x^*: 方程式 $f(x) = 0$ の解
  - K: x^* を含む閉区間
  - f は C^2 級かつ任意の $x \in K$ に対して $f'(x) \neq 0$

とする.

Newton 法の収束の速さについて

- Taylor の定理より, ある $\xi \in (x[n], x^*)$,または $\xi \in (x^*, x[n])$ が存在して,

$$f(x^*) = f(x[n]) + f'(x[n])(x^* - x[n]) + \frac{1}{2}f''(\xi)(x^* - x[n])^2$$

- $f(x^*) = 0$を代入して整理すると

$$f(x[n]) = -f'(x[n])(x^* - x[n]) - \frac{1}{2}f''(\xi)(x^* - x[n])^2$$

- さらに Newton反復の式を代入して整理すると

$$x[n+1] = x^* + \frac{f''(\xi)}{2f'(x[n])}(x^* - x[n])^2$$

Newton 法の収束の速さについて

$$x[n+1] = x^* + \frac{f''(\xi)}{2f'(x[n])}(x^* - x[n])^2$$

- 上の式より

$$|x[n+1] - x^*| = \left|\frac{f''(\xi)}{2f'(x[n])}\right| \cdot |x[n] - x^*|^2$$

- K は閉区間であり,f は K 上で C^2 級かつ任意の $x \in K$ に対して $f'(x) \neq 0$ であるので,

$$c := \max_{x,y \in K} \left|\frac{f''(y)}{2f'(x)}\right| < \infty$$

Newton 法の収束の速さについて

- 以上より,任意の $n = 0, 1, 2, \ldots$ に対して,

$$|x[n+1] - x^*| \leq c|x[n] - x^*|^2$$

- Newton 法は,収束すれば2次収束.

練習問題

- 次の方程式の近似解を求めるための Newton 法を導出せよ.
  1. $3x^3 - 2x - 5 = 0$
  2. $x = 2\sin x$
  3. $e^{-x} = \sin x$
  4. $x = \frac{1}{2} + \sin x$

(ヒント): 方程式 $f(x) = 0$ の近似解を求めるNewton法

$$x[n+1] = x[n] - \frac{f(x[n])}{f'(x[n])}, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

練習問題解答[1]

- $f(x) = 3x^3 - 2x - 5$ より

$$f'(x) = 9x^2 - 2$$

- これより方程式$f(x) = 0$の近似解を求めるNewton法は

$$x[n+1] = x[n] - \frac{f(x[n])}{f'(x[n])} = x[n] - \frac{3x[n]^3 - 2x[n] - 5}{9x[n]^2 - 2},$$
$$n = 0, 1, 2, \ldots$$

で与えられる.

練習問題解答[2]

- $f(x) = x - 2\sin x$ より
$$f'(x) = 1 - 2\cos x$$
- これより方程式$f(x) = 0$の近似解を求めるNewton法は
$$x[n+1] = x[n] - \frac{f(x[n])}{f'(x[n])} = x[n] - \frac{x[n] - 2\sin x[n]}{1 - 2\cos x[n]},$$
$$n = 0, 1, 2, \ldots$$

で与えられる.

練習問題解答[3]

- $f(x) = e^{-x} - \sin x$ より
$$f'(x) = -e^{-x} - \cos x$$
- これより方程式$f(x) = 0$の近似解を求めるNewton法は
$$x[n+1] = x[n] - \frac{f(x[n])}{f'(x[n])} = x[n] + \frac{e^{-x[n]} - \sin x[n]}{e^{-x[n]} + \cos x[n]},$$
$$n = 0, 1, 2, \ldots$$

で与えられる.

練習問題解答[4]

- $f(x) = x - 1/2 - \sin x$ より

$$f'(x) = 1 - \cos x$$

- これより方程式$f(x) = 0$の近似解を求めるNewton法は

$$x[n+1] = x[n] - \frac{f(x[n])}{f'(x[n])} = x[n] - \frac{x[n] - 1/2 - \sin x[n]}{1 - \cos x[n]},$$
$$n = 0, 1, 2, \ldots$$

で与えられる.

反復法の誤差解析

- 反復法

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

- 反復法は大域的に収束する,すなわち任意の$\mathsf{x}[0]\in\mathbb{R}^{\mathsf{N}}$に対して

$$\lim_{\mathsf{n}\to\infty}\mathsf{x}[\mathsf{n}]=\mathsf{x}^*$$

と仮定する.
- 実際の反復法はコンピュータにより実行されるので,
  - 有限回で反復を打ち切ることによる打切り誤差
  - 計算過程での丸め誤差

が必ず生じる.

反復法の打ち切り誤差

- 反復法

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

- 写像 ϕ は $\mathbb{R}^N$ 上の縮小写像とする:

$$\|\phi(x) - \phi(y)\| \le q\|x - y\|, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^N$$

- 反復法を N 回で打ち切ったときの打切り誤差に関して

$$\|x^* - x[N]\| \le \frac{q^N}{1-q}\|\phi(x[0]) - x[0]\|.$$

が成り立つ.(打切り誤差の上界)

丸め誤差を含んだ反復法

- 丸め誤差は有界,すなわち,ある$\delta > 0$が存在して

$$\sup_{\mathrm{n} \geq 0} \|\mathrm{d}[\mathrm{n}]\| \leq \delta, \quad \mathrm{n} = 0, 1, 2, \ldots$$

  と仮定する.
- 初期値 $\mathrm{x}[0]$ には丸め誤差が無いものとする.

丸め誤差を含んだ反復法

- 反復法

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

- $n = 0$

$$x[1] = \phi(x[0])$$

- $x[1]$ が丸められて

$$\tilde{x}[1] = \phi(x[0]) + d[0], \qquad d[0]：丸め誤差$$

- 以下同様にして,$n = 0, 1, 2, \ldots$ に対して

$$\tilde{x}[n+1] = \phi(\tilde{x}[n]) + d[n], \qquad d[n]：丸め誤差$$

- ただし,$\tilde{x}[0] = x[0]$

反復法の丸め誤差

- 丸め誤差 $d[n]$ を含んだ反復法

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

- 写像 ϕ は $\mathbb{R}^N$ 上の縮小写像とする:

$$\|\phi(x) - \phi(y)\| \le q\|x - y\|, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^N$$

- 丸め誤差を含んだ反復法を N 回で打ち切ったときの数値誤差に関して

$$\|x^* - \tilde{x}[N]\| \le \frac{q^N}{1-q}\|\phi(x[0]) - x[0]\| + \frac{1-q^N}{1-q}\delta$$

が成り立つ.(打切り誤差の上界+丸め誤差の上界)

誤差の少ない反復法とは

- 打切り誤差と丸め誤差の評価

$$\|x^* - \tilde{x}[N]\| \leq \frac{q^N}{1-q}\|\phi(x[0]) - x[0]\| + \frac{1-q^N}{1-q}\delta$$

- 縮小写像 ϕ,Lipschitz 定数 q,初期値 x[0], 丸め誤差の最大値 δ が与えられれば,数値計算の実行前に誤差を評価できる.
- δ と q が小さければ,誤差も少ない.
  - q を小さくするには,良いアルゴリズムが必要
  - δ が小さくするには,精度の良い計算機が必要