数値解析 レポート No. 5

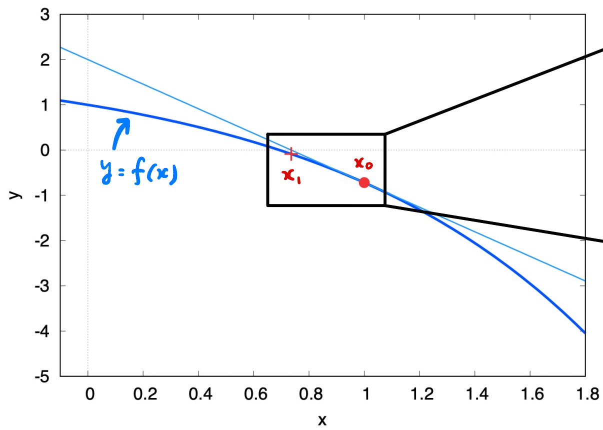
学籍番号

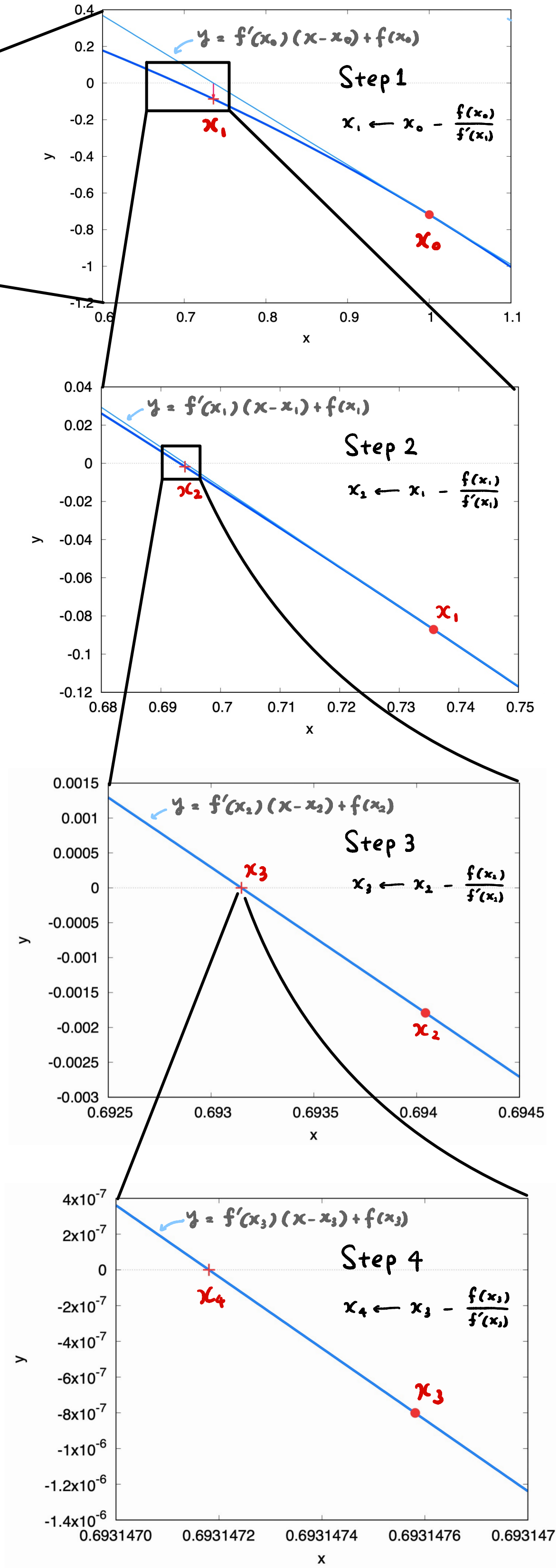
氏名

[〆切] 2020/10/29 19:00

[IV. 求根アルゴリズム (2)]

IV-B. ニュートン法により $f(x) = 2 - e^x$ の根を求めるプログラムを初期値を $x = 1$ として作成し、根の真値を有効数字 10 進 16 桁まで示した $\alpha = 0.6931471805599453$ と比べて絶対誤差が 10^{-8} 以下となる最低の反復回数 n を求めよ。また n 回反復した時の根の近似値と絶対誤差も求めよ。近似値は有効数字 10 進 11 桁以降を切り捨てて求め、絶対誤差は有効数字 10 進 4 桁以降を切り捨ててよ。作成したプログラムも提出すること。プログラミング言語は問わない。





Python 3.6 の例

```
import math
def f_and_dfdx(x):
    exp = math.exp(x)
    return 2 - exp, -exp

x = 1
alpha = 0.6931471805599453
for i in range(100):
    f_0, f_1 = f_and_dfdx(x)
    if abs(alpha - x) <= 10**-8:
        break
    else:
        x = x - f_0 / f_1
```

```
(i=0) 1.000000000000000 誤差 0.306852819440055 残差 0.718281828459045
(i=1) 0.735758882342885 誤差 0.042611701782939 残差 0.087065228634533
(i=2) 0.694042299918915 誤差 0.000895119358970 残差 0.001791040195728
(i=3) 0.693147581059771 誤差 0.000000400499826 残差 0.000000800999813
(i=4) 0.693147180560025 誤差 0.000000000000080 残差 0.000000000000160
```

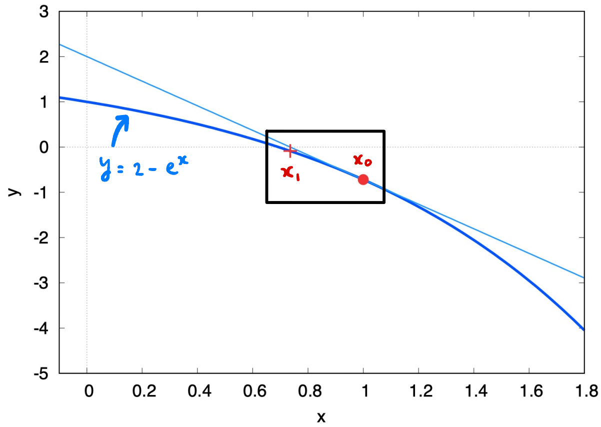
反復回数 4

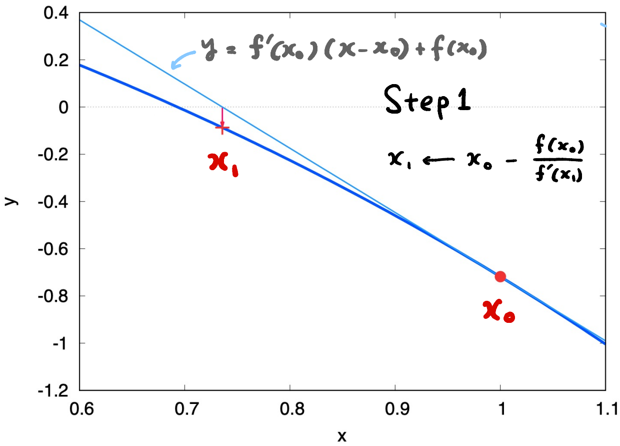
根の近似値 0.6931471805

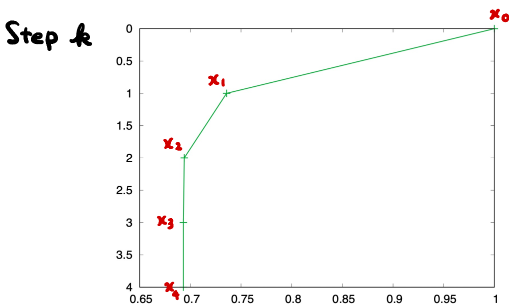
誤差 8.01×10^{-14}

⊙ 絶対誤差と残差をプロット (Ⅳ-B)

2020 10/29

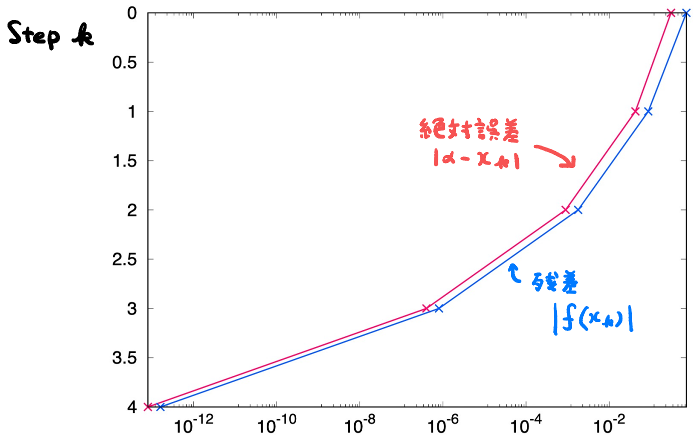




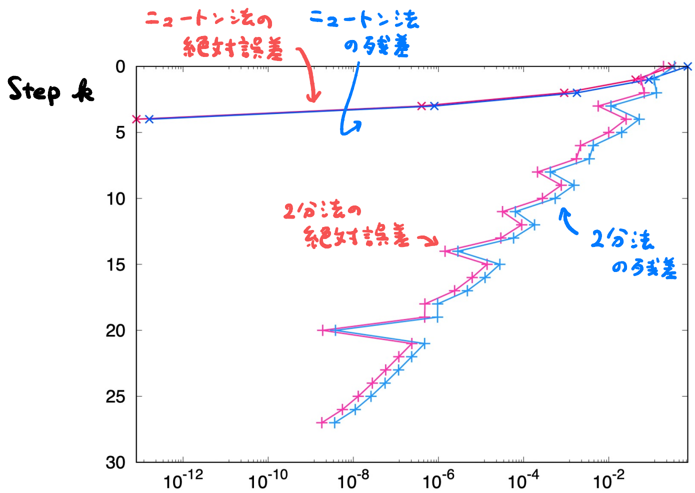


(i=0) 1.000000000000000 誤差 0.306852819440055 残差 0.718281828459045
(i=1) 0.735758882342885 誤差 0.042611701782939 残差 0.087065228634533
(i=2) 0.694042299918915 誤差 0.000895119358970 残差 0.001791040195728
(i=3) 0.693147581059771 誤差 0.000000400499826 残差 0.000000800999813
(i=4) 0.693147180560025 誤差 0.000000000000080 残差 0.000000000000160

反復回数 n=4
根の近似値 0.693147180560025
誤差 8.015810e-14
残差 1.603162e-13



○ 2分法とニュートン法の比較



数値解析 レポート No. 5

学籍番号

氏名

[〆切] 2020/10/29 19:00

[V. 連立一次方程式の数値解法]

V-A. 5×5 の行列 A および 5 次元の縦ベクトル $\boldsymbol{b}$ がそれぞれ以下のように与えられたとする。

$$A = \begin{bmatrix} 14 & 14 & -9 & 3 & -5 \\ 14 & 52 & -15 & 2 & -32 \\ -9 & -15 & 36 & -5 & 16 \\ 3 & 2 & -5 & 47 & 49 \\ -5 & -32 & 16 & 49 & 79 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} -15 \\ -100 \\ 106 \\ 329 \\ 463 \end{bmatrix}.$$

この時行列 A に対して LU 分解および前進代入・後退代入を行うプログラムを作成し連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解 $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, x_3, x_4, x_5]^{\mathsf{T}}$ を有効数字 10 進 3 桁まで求めて 4 桁以降を切り捨てよ。作成したプログラムも提出すること。プログラミング言語は問わない。

```python
# LU factorization
for k in range(n-1): # 0, 1, ..., n-2
    for i in range(k+1, n): # k+1, k+2, ... , n-1
        M[i][k] = A[i][k]/A[k][k]
        A[i][k] = 0
        for j in range(k+1, n): # k+1, k+2, ..., n-1
            A[i][j] = A[i][j] - M[i][k]*A[k][j]
        L[i][k] = M[i][k]
```

```python
# Forward substitution
y[0] = b[0]
for i in range(1, n): # 1, 2, ..., n-1
    sum = 0
    for j in range(i): # 0, ... , i-1
        sum += L[i][j]*y[j]
    y[i] = b[i] - sum
```

```python
# Backward substitution
x[n-1] = y[n-1] / A[i][i]
for i in range(n-2, -1, -1): # n-2, n-1, ..., 0
    sum = 0
    for j in range(i+1,n): # i+1, i+2, ..., n-1
        sum += A[i][j]*x[j]
    x[i] = (y[i] - sum) / A[i][i]
```

$$x = \begin{bmatrix} 3.17 \times 10^{-14} \\ 1.00 \\ 2.00 \\ 3.00 \\ 4.00 \end{bmatrix}$$

十分小さかったら正解.

4

2020
10/29

⊙ LU分解の例 No.1

• 行の基本変形

Step 0

$$A = \begin{bmatrix} \boxed{1 \quad 1 \quad -2} \\ 2 \quad -1 \quad 1 \\ 0 \quad 1 \quad -1 \end{bmatrix}$$

①を −2倍して2行目に足したい.

この操作を実現する行列 M_1 を逆行列 M_1^{-1} とともに左からかける.

$$M_1^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad M_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$\frac{a_{21}}{a_{11}}$ $\left(\frac{a_{31}}{a_{11}}\right)$ $-\frac{a_{21}}{a_{11}}$

Step 1

$$A = M_1^{-1}(\underbrace{M_1 A})$$

$$\begin{bmatrix} 1 \quad 1 \quad -2 \\ \boxed{0 \quad -3 \quad 5} \\ 0 \quad 1 \quad -1 \end{bmatrix}$$

②を $\frac{1}{3}$倍して3行目に足したい.

$$M_2^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1/3 & 1 \end{bmatrix}, \quad M_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1/3 & 1 \end{bmatrix}$$

$\frac{a_{32}}{a_{22}}$ $-\frac{a_{32}}{a_{22}}$

Step 2

$$A = \underbrace{M_1^{-1} M_2^{-1}}(\underbrace{M_2 M_1 A})$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 0 & -1/3 & 1 \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} 1 & 1 & -2 \\ 0 & -3 & 5 \\ 0 & 0 & 2/3 \end{bmatrix}$$

$\frac{a_{21}}{a_{11}}$ $\frac{a_{31}}{a_{11}}$ $\frac{a_{32}}{a_{22}}$

下三角行列 (L)　　上三角行列 (U)

⊙ LU分解の例 No.2

2020 10/29

• ピボット選択

ピボット選択がないと困るケース その1

$a_{kk} = 0$ となる場合.

• $A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 3 \\ 2 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \end{bmatrix}$ だと $a_{11} = 0$ となってLU分解が進められない

最大は a_{21}

$P_{12} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$ とおくと $P_{12}^2 = I$ であり,

$$A = P_{12}^2 A = P_{12} (\underbrace{P_{12} A}_{\begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \\ 0 & 2 & 0 \end{bmatrix}})$$

ピボットを選択することで $a_{11} \neq 0$ にできた.

• $P_{12} A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \\ 0 & 2 & 0 \end{bmatrix}$ だと $a_{22} = 0$ となってLU分解が進められない

最大は a_{32}

$P_{23} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$ とおくと $P_{23}^2 = I$ であり,

$$A = P_{12}^2 A = P_{12} (P_{12} A) = P_{12} P_{23} (\underbrace{P_{23} P_{12} A}_{\begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}})$$

ピボットを選択することで $a_{22} \neq 0$ にできた.

⊙ LU分解の例 No.3

2020 10/29

ピボット選択がないと困るケース その2

a_{kk} の値が小さくなるケース

ε を マシンイプシロン とする.

$r(1+\varepsilon)=1$ となる最大の ε.

$\sup\{\varepsilon \in \mathbb{F} \mid r(1+\varepsilon)=1\}$

浮動小数点数全体

- $A=\begin{bmatrix}\varepsilon & 1\\ 1 & 1\end{bmatrix}$, $\mathbb{b}=\begin{bmatrix}1\\2\end{bmatrix}$ の場合を考える. $A\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix}=\mathbb{b}$ の解は

$$\begin{cases} x_1 = \dfrac{1}{1-\varepsilon} = 1+O(\varepsilon) \\[2ex] x_2 = \dfrac{1-2\varepsilon}{1-\varepsilon} = 1+O(\varepsilon) \end{cases}$$

- A をピボット選択せずに行の基本変換を施した場合

$$A = \underset{\begin{bmatrix}1 & 0\\ 1/\varepsilon & 1\end{bmatrix}}{M^{-1}}\ \underset{\begin{bmatrix}1 & 0\\ -1/\varepsilon & 1\end{bmatrix}}{M}\ A = M^{-1}\begin{bmatrix}\varepsilon & 1\\ 0 & r\left(1-\frac{1}{\varepsilon}\right)\end{bmatrix} = M^{-1}\begin{bmatrix}\varepsilon & 1\\ 0 & r\left(\frac{\varepsilon-1}{\varepsilon}\right)\end{bmatrix} = M^{-1}\begin{bmatrix}\varepsilon & 1\\ 0 & -1/\varepsilon\end{bmatrix}$$

$$A\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix} = M^{-1}\begin{bmatrix}\varepsilon & 1\\ 0 & -\frac{1}{\varepsilon}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1\\2\end{bmatrix}$$

$$\Longleftrightarrow \begin{bmatrix}\varepsilon & 1\\ 0 & -\frac{1}{\varepsilon}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix} = M\begin{bmatrix}1\\2\end{bmatrix}$$

$$(\text{左辺}) = \begin{bmatrix}\varepsilon x_1 + x_2\\ -\frac{1}{\varepsilon}\cdot x_2\end{bmatrix},\quad (\text{右辺}) = \begin{bmatrix}1\\ r(2-2/\varepsilon)\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1\\ -1/\varepsilon\end{bmatrix}$$

$\therefore\ x_2 = 1$, $\quad \varepsilon x_1 + x_2 = 1 \quad \therefore\ x_1 = r\left(\dfrac{r(1-x_2)}{\varepsilon}\right) = 0$

⊙ LU分解のアルゴリズム詳説 No.1

2020
10/29

LU 分解 (ピボット選択なし)
LU factorization (no pivoting)

Input: A
Output: L, A (A は実行後 U になる)

$L \leftarrow I$
for $k = 1, 2, \ldots, n-1$ **:**
  for $i = k+1, k+2, \ldots, n$ **:**
    $m_{ik} \leftarrow a_{ik} / a_{kk}$
    $a_{ik} \leftarrow 0$
    for $j = k+1, k+2, \ldots, n$ **:**
      $a_{ij} \leftarrow a_{ij} - m_{ik} a_{kj}$
    $l_{ik} \leftarrow m_{ik}$

$k=1$ $\quad a_{kj}$

a_{kk} $\quad a_{ik}$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

i $\quad i=k+1=2$ $\quad i=n$

$k=1$

$$m_{21} = \frac{a_{21}}{a_{11}}$$

0

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

$i=k+1=2$ $\quad j=k+1=2$ $\quad j=n$

$$a_{2j} \leftarrow a_{2j} - m_{21} a_{1j}$$

$k=1$

$$m_{n1} = \frac{a_{n1}}{a_{11}}$$

0

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

$j=k+1=2$ $\quad i=n$ $\quad j=n$

$$a_{nj} \leftarrow a_{nj} - m_{n1} a_{1j}$$

2020
10/29

⊙ LU分解のアルゴリズム詳説 No.2

前進代入 ($Ly = b$)

$y_1 \leftarrow b_1$
for $i = 2, \ldots, n$ **:**
  $sum \leftarrow 0$
  for $j = 1, 2, \ldots, i-1$ **:**
    $sum \leftarrow sum + l_{ij} y_j$
  $y_i \leftarrow b_i - sum$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \downarrow$$

- $y_1 = b_1$

- $l_{21} y_1 + y_2 = b_2$

  $\iff y_2 = b_2 - l_{21} y_1$

- $l_{31} y_1 + l_{32} y_2 + y_3 = b_3$

  $\iff y_3 = b_3 - l_{31} y_1 - l_{32} y_2$

- $y_i = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} y_j$

⊙ LU分解のアルゴリズム詳説 No.3

2020 10/29

後退代入 ($Ux = y$)

$x_n \leftarrow y_n / u_{ii}$
for $i = n-1, \ldots, 1$ **:**
  $sum \leftarrow 0$
  for $j = i+1, i+2, \ldots, n$ **:**
    $sum \leftarrow u_{ij} x_j$
  $x_i \leftarrow (y_i - sum) / u_{nn}$

$$
\begin{bmatrix}
u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\
0 & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\
0 & 0 & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & \cdots & u_{nn}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}
\uparrow
$$

- $u_{nn} x_n = y_n$

$$\Leftrightarrow \ x_n = \frac{y_n}{u_{nn}}$$

- $u_{n-1,n-1} x_{n-1} + u_{n-1,n} x_n = y_{n-1}$

$$\Leftrightarrow \ x_{n-1} = (y_{n-1} - u_{n-1,n} x_n) / u_{n-1,n-1}$$

- $x_i = \left(y_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij} x_j \right) / u_{ii}$

◎ 線形代数の演算に関する計算量について No.1

2020 10/29

- $A, B \in \underset{\sim}{\mathbb{F}}^{n\times n}$, $x \in \mathbb{F}^n$ について考える.

浮動小数点数全体

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{nn} \end{bmatrix} \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

- $r(x)$ を $x : \mathbb{R} \to \mathbb{F}$ とする丸め関数とする.
- 計算量を求める時は乗除算の回数を数える

○ Ax 計算量 n^2

$$Ax = \begin{bmatrix} r\left(\sum_{j=1}^{n} r(a_{1j}x_j)\right) \\ r\left(\sum_{j=1}^{n} r(a_{2j}x_j)\right) \\ \vdots \\ r\left(\sum_{j=1}^{n} r(a_{nj}x_j)\right) \end{bmatrix} = \left(r\left(\sum_{j=1}^{n} r(\underbrace{a_{ij}x_j}_{\text{乗算}})\right)\right)_{1\le i\le n}, \quad \text{count} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} 1 = n^2$$

○ AB 計算量 n^3

$$AB = \left(r\left(\sum_{j=1}^{n} r(\underbrace{a_{ij}b_{jk}}_{\text{乗算}})\right)\right)_{1\le i\le n,\ 1\le k\le n}, \quad \text{Count} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} 1 = n^3$$

○ ABx ? ← 計算の順番に依存する.

$$\underbrace{(\overset{n^3}{AB})x}_{n^2}$$ 計算量 $n^3 + n^2$ $(= n^3 + O(n^2))$

$$\underbrace{A(\overset{n^2}{Bx})}_{n^2}$$ 計算量 $2n^2$

$$\left(r\left(\sum_{j=1}^{n} r(a_{ij}b_{jk}x_k)\right)\right)_{1\le i\le n,\ 1\le k\le n}$$ 計算量 $2n^3$

◎ 線形代数の演算に関する計算量について No.2

2020
10/29

• LU分解

LU 分解 (ピボット選択なし)
LU factorization (no pivoting)

Input: A
Output: $L,\ A$ (A は実行後 U になる)

$L \leftarrow I$
for $k = 1, 2, \ldots, n-1$ **:**
  for $i = k+1, k+2, \ldots, n$ **:**
    $m_{ik} \leftarrow \underbrace{a_{ik}/a_{kk}}_{1回}$
    $a_{ik} \leftarrow 0$
    for $j = k+1, k+2, \ldots, n$ **:**
      $a_{ij} \leftarrow a_{ij} - \underbrace{m_{ik}a_{kj}}_{1回}$
    $l_{ik} \leftarrow m_{ik}$

$$\mathrm{count} = \sum_{k=1}^{n-1} \sum_{i=k+1}^{n} \Bigl(1 + \underbrace{\sum_{j=k+1}^{n} 1}_{n-k}\Bigr)$$

$$= \sum_{k=1}^{n-1} \underbrace{\sum_{i=k+1}^{n}}_{} (1 + n - k)$$

$$= \sum_{k=1}^{n-1} (n-k)(1+n-k)$$

$k : 1, 2, \cdots, n-1$ のとき
$n-k : n-1, n-2, \cdots, 1$ であるから $p = n-k$ とおくと

$$\mathrm{Count} = \sum_{p=n-1}^{1} p\,(1+p) = \sum_{p=1}^{n-1} (\underbrace{p^2}_{\frac{1}{6}(n-1)n(2n-1)} + \overbrace{p}^{\frac{1}{2}(n-1)n})$$

$$= \frac{1}{3}n^3 + O(n^2) \quad /\!/$$

• 前進代入

$y_1 \leftarrow b_1$
for $i = 2, \ldots, n$ **:**
  $sum \leftarrow 0$
  for $j = 1, 2, \ldots, i-1$ **:**
    $sum \leftarrow sum + l_{ij}y_j$
  $y_i \leftarrow b_i - sum$

$$\mathrm{count} = \sum_{i=2}^{n} \underbrace{\sum_{j=1}^{i-1} 1}_{i-1} = \sum_{i=2}^{n} (i-1)$$

$$= \sum_{i'=1}^{n-1} (i'+1-1) = \sum_{i'=1}^{n-1} i' = \frac{1}{2}(n-1)n$$

$$= \frac{1}{2}n^2 + O(n) \quad /\!/$$

• 後退代入

$x_n \leftarrow y_n/u_{ii}$
for $i = n-1, \ldots, 1$ **:**
  $sum \leftarrow 0$
  for $j = i+1, i+2, \ldots, n$ **:**
    $sum \leftarrow u_{ij}x_j$
  $x_i \leftarrow (y_i - sum)/u_{nn}$

$$\mathrm{count} = \sum_{i=n-1}^{1} \Bigl\{\Bigl(\underbrace{\sum_{j=i+1}^{n} 1}_{n-i}\Bigr) + 1\Bigr\}$$

$$= \sum_{i=n-1}^{1} (n-i+1)$$

$i : n-1, n-2, \cdots, 1$ のとき
$n-i : 1, 2, \cdots, n-1$ であるから
$p = n-i$ とおくと

$$\mathrm{Count} = \sum_{p=1}^{n-1} (\underbrace{p}_{\frac{1}{2}(n-1)n}+1) = \frac{1}{2}n^2 + O(n) \quad /\!/$$