

数値解析

大坂博幸
立命館大学理工学部

目次

はじめに	i
1 数値解析とは	1
1.1 この授業の目標	1
2 コンピュータにおける数の世界	2
2.1 コンピュータが取り扱える数値	2
2.2 整数型数値	2
2.3 2の補数	3
2.4 n進法	4
2.5 実数型数値	7
2.6 誤差	8
3 数値解析の手順	10
3.1 手順とは	10
3.2 アルゴリズム	10
4 非線形方程式	13
4.1 この節の目標	13
4.2 線形とは	13
4.3 2分法	13
4.3.1 幾何学的意味	15
4.4 ニュートン近似	15
4.4.1 アルゴリズム	15
4.5 幾何学的意味	16
4.5.1 理論的背景	16
4.5.2 計算量と収束度	20
4.5.3 問題点	22
4.6 距離空間における縮小写像定理	23

5	連立方程式の解法	24
5.1	この節の目標	24
5.2	関数解析の話題	24
5.3	連立方程式に対する反復法	24
5.3.1	縮小写像の原理	24
5.3.2	ニュートン近似	26
5.4	連立1次方程式の反復法	29
5.4.1	ヤコビ法	29
5.4.2	ガウス・ザイデル法	30
5.5	ガウスの消去法	31
5.5.1	基本的事項	31
5.5.2	ガウスの消去法	32
5.5.3	LU分解	34
5.6	LU分解の応用	37
6	関数近似と補間法	40
6.1	この節の目標	40
6.2	ヒルベルト空間論	40
6.3	関数近似	41
6.4	ラグランジェの補間公式	46
7	数値積分法	50
7.1	この節の目標	50
7.2	等間隔分点の数値積分法	50
7.2.1	区分求積法	50
7.2.2	ニュートン・コーツの公式	51
7.2.3	誤差	52
7.3	不等間隔の数値積分法 (ガウスの数値積分)	53
8	微分方程式	55
8.1	この節の目標	55
8.2	理論的解説	55
8.3	ルンゲ・クッタ型公式	56
8.4	オイラー法	57
8.5	ホイン法 (2次のルンゲ・クッタ公式)	58
8.6	ルンゲ・クッタ公式 (4次)	58
8.7	幾何的意味	60

9	練習問題	61
9.1	第2節	61
9.2	第4節	62
9.3	第5節	63
9.4	第6節	64
9.5	第7節	65
9.6	第8節	66

はじめに

このノートを書くにあたり、久保智史氏に大変お世話になりました。この紙面を持ちまして感謝いたします。

以下にこのノートを作成するに置いて参考にした書籍を載せます。

参考図書

- (1) 数値解析の常識, 伊里正夫・藤野和建, 共立出版.
- (2) 数値計算, 川上一郎, 岩波書店.
- (3) 数値計算の基礎と応用, 杉浦 洋, サイエンス社.
- (4) 数値解析入門, 新濃清志・船田哲男著, 近代科学社.
- (5) 数値計算, 州之内治男, サイエンス社.
- (7) 数値解析法, 森 正武, 朝倉書店.
- (6) Elementary numerical analysis, S. D. Conte and C. de Boor, McGraw-Hill International Edition.
- (7) C 言語によるプログラミング 1, 2, 内田智史, オーム社開発局.

数学関係は、学部 1, 2 年で用いたテキストを読み直してみればいいでしょう。興味のある方は下記の本を眺めてみては如何でしょう。

- (8) 線形代数入門, 斉藤正彦, 東京大学出版会.
- (9) 微分積分学 I, II, 三村征雄, 岩波全書.
- (10) ヒルベルト空間と線形作用素, 日合文雄・柳研二郎, 牧野書店.

1 数値解析とは

1.1 この授業の目標

この授業では、数学的問題を有限回操作で解くためのアルゴリズムについて解説する。授業では電卓を用いて簡単な演習をしていただくので各自用意をすること。また理論的なことにも触れていく。

内容は以下の通り：

- (1) 計算機と数値の関係. アルゴリズム, 誤差.
- (2) 非線形方程式の解法.
二分法, ニュートン法.
- (3) 連立一次方程式の解法.
ガウス・ジョルダン法, ガウス法, LU分解, ヤコビ法, ガウス・ザイデル法.
- (4) 関数近似と補間法.
最小二乗近似, ラグランジェの補間法, ニュートン前進補間公式.
- (5) 数値積分法.
区分求積法, ニュートン・コーツ法, 台形公式, シンプソン公式, ガウスの数値積分公式.
- (6) 一階常微分方程式の解法.
オイラー法, ホイン法, ルンゲ・クッタ型公式.

2 コンピュータにおける数の世界

2.1 コンピュータが取り扱える数値

コンピュータが取り扱える数値は,

- (1) 整数型 (10進数表示): 0, 100, -10, など 符号 + 数値の大きさ.
- (2) 実数型 (10進数表示): 0.001, 3.14, -1.234×10^2 など
符号あるいは小数点 + 数値の大きさ.

2.2 整数型数値

コンピュータの中では2進数に変換されて記憶される. 例えば, $4_{10} \rightarrow 100_2$. 2進数の各行をビット (bit) といい, 2の補数を用いてマイナスの符号を決めている.

1. (i) 短い整数型 (short): 符号をあわせて16ビット.

$$\begin{array}{ccc} \text{範囲: } 1000000000000000_2 & \sim & 0111111111111111_2 \\ & \parallel & \parallel \\ & (-2^{15})_{10} = -32768 & \sim (2^{15} - 1)_{10} = 32767 \end{array}$$

- (ii) 長い整数型 (long): 符号をあわせて32ビット.

$$\text{範囲: } (-2^{31})_{10} = -2147483648 \sim (2^{31} - 1)_{10} = 2147483647$$

注意 16ビットのとき,

$$1111111111111111_2 + 0000000000000001_2 = 0000000000000000_2$$

となるので (17ビット以降は無視), $1111111111111111_2 = (-1)_{10}$. よって,
 $1000000000000000_2 = (-1 - (2^{15} - 1))_{10} = (-2^{15})_{10}$ となる.

2.3 2の補数

2進法で負の数を表示するとき次のようになる。

4ビットの場合:

2進法表示	10進法表示
0001	1
0010	2
0011	3
0100	4
0101	5
0110	6
0111	7
0000	0
1111	-1
1110	-2
1101	-3
1100	-4
1011	-5
1010	-6
1001	-7
1000	-8

負の求め方として次の補数の概念がある。

定義 2.3.1. 2進数の1の補数とは、各桁を1としたものから与えられた数を引いて求められたものをいう。

例 2.3.2 (4ビットコンピュータの場合). $(0001)_2$ の1の補数は、

$$(1111)_2 - (0001)_2 = (1110)_2$$

となる。

定義 2.3.3. 2進数の2の補数とは、1の補数に1を加えて求められたものをいう。

例 2.3.4 (4ビットコンピュータの場合). $(0001)_2$ の2の補数は

$$(1110)_2 + (0001)_2 = (1111)_2$$

となる。よって、4ビットの場合 $(1111)_2$ で -1 を表している (上の表を見よ)。

2.4 n進法

コンピュータで用いられている進法は2進法以外に、8進法、16進法がある。2進法と同様に a が n 進法で表示されているとき $(a)_n$ と書くとする、

$$(a_n a_{n-1} \cdots a_1 a_0)_m = (a_n \times m^n + a_{n-1} \times m^{n-1} + \cdots + a_1 \times m + a_0)_{10}$$

となる。

このような計算には次のような手順を踏めばよい。

計算法 2.4.1. 今 a_0, a_1, \dots, a_n が与えられていて

$$p(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$$

を考える。このとき $p(\beta)$ の求め方は、

$$\begin{aligned} b_n &:= a_n \\ b_{n-1} &:= a_{n-1} + b_n \beta \\ b_{n-2} &:= a_{n-2} + b_{n-1} \beta \\ &\vdots \\ b_0 &:= a_0 + b_1 \beta \end{aligned}$$

としたとき、 $b_0 = p(\beta)$ 。

(1) これを用いて2進法を10進法に変換しよう。

例 2.4.2. $(1101)_2 = 1 \cdot 2^3 + 1 \cdot 2^2 + 0 \cdot 2 + 1$ より

$$\begin{aligned} b_3 &= 1 \\ b_2 &= 1 + 1 \times 2 = 3 \\ b_1 &= 0 + 3 \times 2 = 6 \\ b_0 &= 1 + 6 \times 2 = 13 \end{aligned}$$

となり、 $(1101)_2 = (13)_{10}$ を得る。

10進法を2進法に変換してみよう。

例 2.4.3.

$$\begin{aligned} (187)_{10} &= 1 \times 10^2 + 8 \times 10 + 7 \\ &= (1)_2(1010)_2^2 + (1000)_2(1010)_2 + (111)_2 \end{aligned}$$

より

$$\begin{aligned} b_2 &= (1)_2 \\ b_1 &= (1000)_2 + (1)_2 \times (1010)_2 = (10010)_2 \\ b_0 &= (111)_2 + (10010)_2 \times (1010)_2 = (10111011)_2 \end{aligned}$$

(2) 2進法を8進法に変換する方法は, 3ブロックごとに展開していく.

例 2.4.4. $(11010110)_2$ の場合

$$(11 | \underbrace{010}_3 | \underbrace{110}_3) \implies (326)_8$$

8進法から2進法はこの逆を行う.

(3) 2進法を16進法に変換する方法は, 4ブロックごとに展開していく.

例 2.4.5. $(11010110)_2$ の場合

$$(\underbrace{1101}_4 | \underbrace{0110}_4) \implies (136)_{16}$$

整数同様 n 進数の小数表示を

$$(0.a_1a_2 \cdots a_l)_n$$

と表す.

次のアルゴリズムを用いれば小数の場合も変換ができる.

アルゴリズム 2.4.6. x を n 進数小数表示されている数とする. β を 1 より大きい自然数とし次のような手順を勧める.

$$\begin{aligned} c_0 &:= x \\ b_1 &:= (\beta c_0)_I & c_1 &:= (\beta c_0)_F \\ b_2 &:= (\beta c_1)_I & c_2 &:= (\beta c_1)_F \\ \vdots & & \vdots & \end{aligned}$$

ただし, $(a)_I$ は, a の整数部分, $(a)_F$ は a の小数部分を意味する.

このとき

$$x = (0.b_1b_2b_3 \cdots)_\beta = \sum_{k=1}^{\infty} b_k \beta^{-k}$$

例 2.4.7. $x = (0.101)_2$ とし, これを 10 進法小数表示をする.

$$\begin{aligned} b_1 &= (10(0.101)_2)_I = ((1010)_2(0.101)_2)_I = ((110.010)_2)_I = (110)_2 = 6 \\ c_1 &= (0.01)_2 \\ b_2 &= ((1010)_2(0.01)_2)_I = ((10.01)_2)_I = (10)_2 = 2 \\ c_2 &= (0.1)_2 \\ b_3 &= ((1010)_2(0.1)_2)_I = ((101)_2)_I = (101)_2 = 5 \\ c_3 &= 0 \end{aligned}$$

より, $(0.101)_2 = (0.625)_{10}$.

逆に $x = (0.625)_{10} = 0.625$ (10 を省略) とし、これを 2 進法小数表示をする. (答えは知っているが)

$$b_1 = (2 \times 0.625)_I = (1.25)_I = 1$$

$$c_1 = (1.25)_F = 0.25$$

$$b_2 = (2 \times 0.25)_I = (0.5)_I = 0$$

$$c_2 = (0.5)_F = 0.5$$

$$b_3 = (2 \times 0.5)_I = (1.0)_I = 1$$

$$c_3 = 0$$

よって, $(0.625)_{10} = (0.101)_2$.

2.5 実数型数値

計算機内で適当に切り上げて $\beta = 16$ 進法で

$$\pm(0.d_1d_2d_3d_4d_5d_6)_\beta \times \beta^b$$

で表示する。但し、

$$\pm(0.d_1d_2d_3d_4d_5d_6)_\beta = \pm \left(\frac{d_1}{\beta} + \frac{d_2}{\beta^2} + \cdots + \frac{d_6}{\beta^6} \right)$$

($0 < d_1 \leq 15, 0 \leq d_i \leq 15 (i \geq 2), b:7$ ビット)。

ここで、 $d_1 > 0$ としているのは表示を一意的にするためである。例えば、10進数表示の場合、

$$\begin{aligned} 1.234567 &\rightarrow +0.1234567 \times 10^1 \\ 6.02 \times 10^{23} &\rightarrow +0.602 \times 10^{24} \end{aligned}$$

と一意的に表示することを意味する。

また、符号の部分に1ビット、仮数の部分 $0.d_1d_2d_3d_4d_5d_6$ に24ビット、指数部 b の部分に7ビット用いられており ($-2^6 \leq b \leq 2^6 - 1$)、全部で $32 (= 1 + 24 + 7)$ ビット表示となっている。

この場合最大値は、

$$\left(\frac{15}{16} + \frac{15}{16^2} + \cdots + \frac{15}{16^6} \right) \times 16^{63} :=: 17 \times 10^{75}$$

であり、これより値が大きいときは警告が発生され停止し正しい計算ができない。(このようなときオーバーフローという) 最小値は、

$$\frac{1}{16} \times 16^{-64} = 16^{-65} :=: 5 \times 10^{-79}$$

となり、これより小さい値に対しては0として計算が維持される。(このようなときアンダーフローという)

(注::=: の意味は約を表している)

このため計算の順序により値が異なってしまうときがある。

例 2.5.1.

$$\begin{aligned} (10^{-50} \times 10^{-40}) \times 10^{60} &= 0 \times 10^{60} &= 0 \\ 10^{-50} \times (10^{-40} \times 10^{60}) &= 10^{-50} \times 10^{20} &= 10^{-30} \end{aligned}$$

上の表示は単精度の表示であり、現在はその二倍の倍精度の表示が用いられている。但し、指数部分 (b) は同じで、仮数部分 (d_i) は14(56ビット)ある。

2.6 誤差

数値計算では有限桁の数値だけを取り扱うので誤差 (真の数との差) が生ずる.

(1) 絶対誤差:

a を真の数, x をその近似値としたとき $e = x - a$ を誤差といい, $|e| = |x - a|$ を絶対誤差という.

(2) 相対誤差:

上の表現を用いて, 相対誤差 e_R を $e_R = \frac{e}{a} = \frac{x-a}{a}$ であらわす. 実用的には, $e_R = \frac{e}{x}$ を用いる.

(3) 許容誤差:

許容絶対誤差を ϵ_A , 許容相対誤差を ϵ_R としたとき, 近似値 x が下記の条件を満たしたとき真の値に十分近いと判断する:

$$\begin{aligned} |x - a| &< \epsilon_A \\ \frac{|x-a|}{|x|} &< \epsilon_R \end{aligned}$$

ϵ_A として使用しているコンピュータで使用できる 0 以外の最小の絶対値数を採用し, ϵ_R として計算機イプシロンを採用してかまわない. 但し, 計算機イプシロンとは $1 + \epsilon \geq 1$ となる最小の ϵ のことである. (プログラムを書いて RAINBOW のマシンの計算機イプシロンを自分で調べて見よ)

(3) 丸め誤差:

真の数を適当なところで四捨五入し切り捨て, 切り上げて生じた誤差. (β 進法のとき $\frac{\beta}{2}$ で入り, $\frac{\beta}{2} - 1$ で切り)

(i) 情報落ち:

絶対値の差が大きな 2 つの数の加減で小さな値が無視される.

例 2.6.1. (1)1234.5(2)0.12345(3)0.098706 を有効桁数 5 桁で (1) + (2) + (3) を計算してみると 1234.7 となる. しかし実際は, 1234.722156 であり情報落ちが発生している.

(ii) 桁落ち:

減算や異符号で絶対値の近い数の加算をおこなった際に生じる有効桁数の減.

例 2.6.2. $a = 1.23456$, $b = 1.23421$ を有効桁数 6 桁で $a - b$ を計算をしてみる.

$$a - b = 0.00035 = 0.35 \times 10^{-3}$$

と桁落ちが発生している.

例 2.6.3. 二次方程式 $ax^2 + bx + c = 0$ ($a \neq 0$) を解く際は解の公式 $x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$ を直接使用すると桁落ちが発生する. 一般に,

$$\begin{aligned} b > 0 &\implies -b + \sqrt{b^2 - 4ac} \text{ で桁落ちが発生} \\ b < 0 &\implies -b - \sqrt{b^2 - 4ac} \text{ で桁落ちが発生} \end{aligned}$$

する. よって, $b < 0$ ならば, $x_1 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$ で求め, x_2 は解と係数の関係で $x_2 = \frac{c}{ax_1}$ をもとめる. $b > 0$ に対しては, $x_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$, $x_2 = \frac{c}{ax_1}$ で求める.

例 2.6.4. $\sqrt{12346} - \sqrt{12345}$ を 6 桁で計算してみよう.

(1) 直接計算する. $\sqrt{12346} :=: 111.113$, $\sqrt{12345} :=: 111.108$. よって

$$\sqrt{12346} - \sqrt{12345} :=: 0.005.$$

(2) 変形をする.

$$\begin{aligned} \sqrt{12346} - \sqrt{12345} &= \frac{1}{\sqrt{12346} + \sqrt{12345}} \\ &:=: \frac{1}{111.113 + 111.108} \\ &= \frac{1}{222,221} :=: 0.00450002 \end{aligned}$$

真の値は, 0.0045000326 である.

(iii) 積み残し:

情報落ちが原因で発生する現象.

例 2.6.5. 次の計算を考える.

$$\begin{aligned} (1) S &= 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \cdots + \frac{1}{10000} \\ (2) S &= \frac{1}{10000} + \frac{1}{999} + \cdots + \frac{1}{2} + 1 \end{aligned}$$

(2) の方が精度はよい. 実際, 単精度 (*float in C 言語*) で計算した場合 (1) = 9.7876129150390625, (2) = 9.78750433197021484375 となり (2) の方が真の値に近い.

(iv) 打ち切り誤差:

無限級数など有限個の和で打ち切った際に生じる誤差.

(v) 代入誤差:

関数 $f(x)$ に真の数 a の代わりに近似値 x を代入した際などに生じる誤差.
(この場合は $f(x) - f(a)$)

3 数値解析の手順

3.1 手順とは

何かの問題を実験的に調べたいとき、それが計算にのる問題であるとか、結果をどう評価するかなどがはっきりしていないと、いくら高級なコンピュータを与えられていても「何とかに真珠」となってしまう。それを避けるために、次のような手順を意識して取り組む必要がある。

(1) 問題の解析

(i) 問題の明確化

誰が (対象), 何のために (目的), どのように (環境) そのシステムを使用するか。

(ii) 問題の適・不適

(iii) 問題の再構築

問題が不適なときもう一度考え直す。

(2) アルゴリズムの構成

(3) プログラミング (C 言語・Pascal・Fortran etc)

(4) 計算の実行と結果の検討

この中で、(2) と (3) が大切な部分であろう。

プログラミングに対しては次の構造化定理にのっとりって単純な制御構造をもつプログラミングを書くように意識する。

定理 3.1.1 (構造化定理 (E. W. Dijkstra)). すべてのプログラムは接続, 判断, および前判定反復の 3 つの基本的制御構造だけで書くことができる。

但し, 接続は代入文だけで構成されているもの, 判断は if then else で構成されているもの, 前判定反復は while 文などで構成されているもの。

一般には, 複雑な問題を簡単な問題に帰着させていくトップダウン方式と, 必要となる関数を作成し, それらを組み立ててプログラムを作成するボトムアップ方式を平行して用いてプログラムを作成します。

3.2 アルゴリズム

アルゴリズムとは計算を行うための一連の指示のことを言う。

例えば, 第 1 節の多項式 $p(x)$ をもとめるアルゴリズム 4.1 を思い出そう:

$$p(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$$

直接計算を試みると, $x^2, x^3 \dots x^n$ を計算し, つぎに $a_n x^n, a_{n-1} x^{n-1}, \dots, a_1 x, a_0$ を計算して足しあわせる. このとき, 乗算に $(n-1) + n = 2n-1$ 回, 加算に n 回必要である. これを, 最初に

$$a_n x + a_{n-1}$$

を計算し, 次に

$$\begin{aligned} & (a_n x + a_{n-1})x + a_{n-2} \\ & ((a_n x + a_{n-1})x + a_{n-2})x + a_{n-2} \\ & \vdots \end{aligned}$$

とすると, n 回目に求める値 $p(x)$ が得れる. このとき, 乗算・加算の回数はそれぞれ n 回ですむ. つまり計算量を考えると後者の方が早く答えが得られる.

後者の方法はホーナー法と言われており, 次のような手順で表現できる:

- (1) $y_{-1} = 0$ とおく.
- (2) $k = 0, 1, \dots, n$ にたいして,

$$y_k = y_{k-1}x + a_{n-k}$$

を計算する.

- (3) y_n が求めるもの.

このような一連の指示をアルゴリズムという.

次の例を考えよう!

アルゴリズム 3.2.1. (1) x_0 を $\sqrt{\alpha}$ に近い適当な数とする. ($\alpha > 0$)

(2) $n = 0, 1, 2, \dots$ に対して

$$x_{n+1} = \frac{1}{2} \left(x_n + \frac{\alpha}{x_n} \right)$$

を求める.

上のアルゴリズムは何を求めるものか想像できたであろうか?

答えは $\sqrt{\alpha}$ を求めるアルゴリズムである. プログラムを書く場合, 有限操作で終われるよう条件を付けなければならないが, 例えば, 許容誤差 10^{-10} で行うと, 小数点以下第 9 行まで正確な値を求めることができる. つまり, $|x_n - x_{n-1}| < 10^{-10}$ となった時点で x_n を近似解として採用する.

因みに, $\alpha = 2$ として私の電卓 (10 桁表示) で上のアルゴリズムを $x_0 = 2.0$ で実施すると, $x_4 = 1.414213562$, $x_5 = 1.414213563$ 以下交互に繰り返しあらわれる.

丸め誤差のためこのようなことが起こると考えられる.

ここで, 上の数列 $\{x_n\}$ が収束すると信じて行ったが, 実際はプログラムを組む前に確認しなければならない. $x_0 > \sqrt{\alpha}$ から出発した場合は, 下記のようにそれが証明できる:

証明

$$x_{n+1} - \sqrt{\alpha} = \frac{1}{2} \left(x_n + \frac{\alpha}{x_n} \right) - \sqrt{\alpha} = \frac{(x_n - \sqrt{\alpha})^2}{2x_n}$$

より,

$$\begin{aligned} x_{n+1} - \sqrt{\alpha} &\leq \frac{(x_n - \sqrt{\alpha})^2}{2\sqrt{\alpha}} \\ &= 2\sqrt{\alpha} \left(\frac{x_n - \sqrt{\alpha}}{2\sqrt{\alpha}} \right)^2 \\ &\leq 2\sqrt{\alpha} \left(\frac{x_{n-1} - \sqrt{\alpha}}{2\sqrt{\alpha}} \right)^4 \\ &\leq 2\sqrt{\alpha} \left(\frac{x_{n-2} - \sqrt{\alpha}}{2\sqrt{\alpha}} \right)^8 \\ &\vdots \\ &\leq 2\sqrt{\alpha} \left(\frac{x_0 - \sqrt{\alpha}}{2\sqrt{\alpha}} \right)^{2^{n+1}} \end{aligned}$$

よって,

$$\frac{x_0 - \sqrt{\alpha}}{2\sqrt{\alpha}} < 1$$

のとき, 数列は収束する. ♠

次節ではもう少し違う見方でアプローチする.

4 非線形方程式

4.1 この節の目標

次の2つの方法を用いて非線形方程式を解くことを解説する.

- 2分法
- ニュートン法

4.2 線形とは

方程式 $f(x) = 0$ ($x \in \mathbb{R}^n, f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$) を解く上で線形方程式であるかないかは大きい違いがある. ここで方程式が線形であるとは,

$$f(\alpha x + \beta y) = \alpha f(x) + \beta f(y)$$

が成立することである. $n = m = 1$ のときは, f が線形であることと $f(x) = \alpha x$ と書けることは同値である (何故か?).

例えば, $f(x) = x^2$ は線形性を満たさない (何故か?).

一方, 線形方程式は線形代数の理論が使えるので見通しの良い解法がある.

4.3 2分法

$x^2 = 2$ となる方程式などを非線形方程式というが, これを満たす近似解を求めることを試みる. 基本的アイデアは次の中間値の定理.

中間値の定理

f を区間 $[a, b]$ 上の連続関数で $f(a)f(b) < 0$ とする. このとき $f(c) = 0$ となる c が (a, b) に少なくとも一つ存在する.

この考えで, $f(x) = x^2 - 2$ の解 α を求めようとする (近似値はわかっているが),

$1 < \alpha < 2$	$\frac{1+2}{2} = 1.5$	$f(1.5) = 0.25$
$1 < \alpha < 1.5$	$\frac{1+1.5}{2} = 1.25$	$f(1.25) = -0.4375$
$1.25 < \alpha < 1.5$	$\frac{1.25+1.5}{2} = 1.375$	$f(1.375) = -0.109375$
$1.375 < \alpha < 1.5$	$\frac{1.375+1.5}{2} = 1.4375$	$f(1.425) = 0.06640625$
$1.375 < \alpha < 1.4375$	$\frac{1.375+1.4375}{2} = 1.40625$	$f(1.40625) < 0$
$1.40625 < \alpha < 1.4375$	$\frac{1.40625+1.4375}{2} = 1.421875$	$f(1.421875) > 0$
$1.40625 < \alpha < 1.421875$	$\frac{1.40625+1.421875}{2} = 1.4140625$	$f(1.4140625) < 0$
$1.4140625 < \alpha < 1.421875$	$\frac{1.4140625+1.421875}{2} = 1.41946875$	$f(1.41946875) > 0$

上の過程では、小数点以下第2位まで正しい値が求まっていることがわかる。実際、 $|1.4140625 - 1.421875| = 0.0078125 < 10^{-2}$ から判定できる。よって、許容誤差 10^{-2} のとき 1.41 を近似値として採用する。

このことより、2分法のアルゴリズムは以下の通りになる：

アルゴリズム 4.3.1. (1) $f(a) < 0, f(b) > 0$ となる a, b を設定する。

(2) $c := \frac{a+b}{2}$ とおき、 $\frac{|a-b|}{2} < \varepsilon$ ならばステップ (3) に移る。そうでないときは、

$$f(c) > 0 \rightarrow b := c \text{ (} a \text{ はそのまま)} \rightarrow \text{ステップ (2)}$$

$$f(c) < 0 \rightarrow a := c \text{ (} b \text{ はそのまま)} \rightarrow \text{ステップ (2)}$$

$$f(c) = 0 \rightarrow \text{ステップ (3)}$$

(3) c を近似解として採用する。

注 (1) 上の $b := c$ は b に c を代入する、あるいは、新しい b として c を採用するの意味である。

注 (2) $f(a) > 0, f(b) < 0$ のときは、(2) の不等号を逆にすればよい。

問題は、ステップ (1) を満たす a, b を見つけることである。しかしながら、次に述べるニュートン法に比べて、確実な方法である。

計算量は、ステップ (2) で要する計算量を一回分と見なせば、

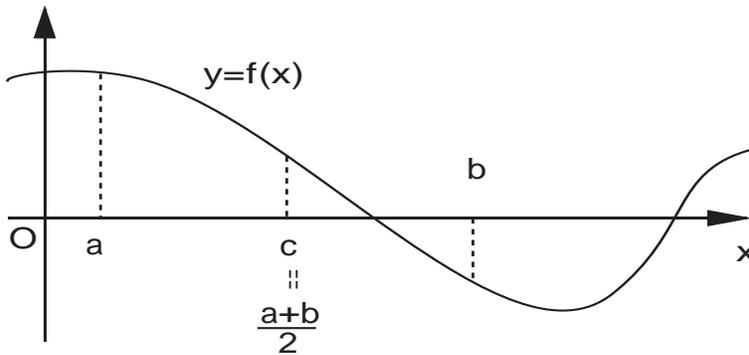
$$\frac{|a-b|}{2^{n+1}} < \varepsilon$$

を満たすと最小の n が求めるもの、即ち、

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

を満たす最小の n である。

4.3.1 幾何学的意味



4.4 ニュートン近似

前回説明したホーナー法のアルゴリズムを直接法, $\sqrt{\alpha}$ のアルゴリズムを反復法という. 即ち, 一定の手順を一回繰り返すだけで解を求める方法が直接法であり, ある初期値から出発して繰り返し演算をおこない, 満足のいく精度に達したところで止めて, 近似解を求めるのが反復法である.

ニュートン法は反復法の代表であり, 以下のアルゴリズムでおこなう.

4.4.1 アルゴリズム

$f(x)$ が $[a, b]$ 上で連続であり, かつ, $f'(x) \neq 0$ とする. さらに $f(x) = 0$ の解 α が (a, b) 内にあるとする.

- (1) $f(x) = 0$ の解 α の近くに初期値 x_0 を選ぶ.
- (2) $x_k := x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})}$
- (3) 定められた精度 ε (許容誤差) にたいして
 - (i) $\frac{|x_k - x_{k-1}|}{|x_k|} < \varepsilon$ ならば, x_k を近似解として採用.
 - (ii) $\frac{|x_k - x_{k-1}|}{|x_k|} \geq \varepsilon$ ならば k を $k + 1$ とおきかえて (2) から繰り返す.

注意 1. ここで収束値の先頭桁数がわからないので, 精度の評価として絶対相対評価を使っている.

例 4.4.1. 許容誤差 0.001 で真の値 $x = 0.0123$ を求めようとする, $y = 0.012$ に対して

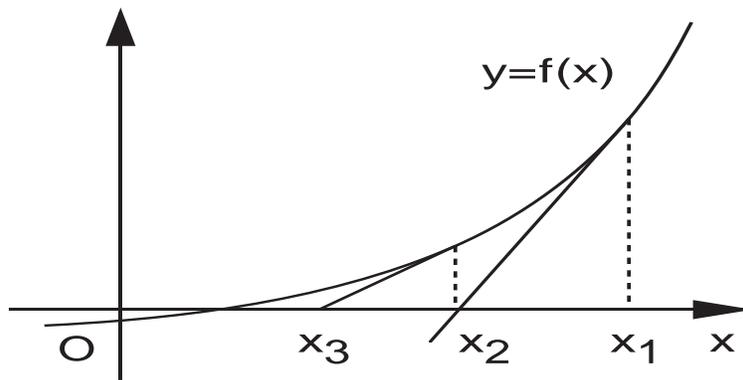
$$|x - y| = 0.0003 < 0.001$$

となるので, 収束値の先頭桁数小数点以下 3 桁の時は絶対誤差評価でを求めるときは正確な近似値が求められない. ちなみにこのとき絶対相対誤差評価 0.001 で求めようとするとき,

$$\frac{|x - y|}{|x|} = 0.243902439 > 0.001$$

となりアルゴリズムは継続される.

4.5 幾何学的意味



上記の図で点 $(x_1, f(x_1))$ における接線の方程式を求めてみると,

$$y - f(x_1) = f'(x_1)(x - x_1)$$

となる. この接線と x 軸の交点を求めてみると,

$$x = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}$$

でこれが x_2 を意味する.

4.5.1 理論的背景

今, $f(x)$ が区間 $I = [a, b]$ 上の連続関数で $f(x) = 0$ となる $x \in I$ が存在するとする. $h(x)$ を I 上で連続な関数で I 上で 0 をとらないとしたとき, $g(x) = x - h(x)f(x)$ とおく. さらに $x_0 \in I$ を適当にとり,

$$x_k = g(x_{k-1}) \quad (k = 1, 2, \dots)$$

と数列を定義したとき、もし、これが収束点 α を持てば、 $f(\alpha) = 0$ となる。実際、 g の連続性より、

$$\begin{aligned} g(\alpha) &= \lim_{k \rightarrow \infty} g(x_k) = \lim_{k \rightarrow \infty} x_{k+1} = \alpha \\ \alpha - h(\alpha)f(\alpha) &= \alpha \\ h(\alpha)f(\alpha) &= 0. \end{aligned}$$

$h(\alpha) \neq 0$ より、 $f(\alpha) = 0$.

先のニュートン法では、 $h = \frac{1}{f'}$ に対応している。

そうすると問題はいつ $\{x_k\}$ が収束するかになる。これについては次の縮小写像の定理がキーになっている。

定理 4.5.1 (縮小写像定理). f が $I = [a, b]$ 上で定義された関数で次の条件を満たすとする。

- (1) f は I 上で連続.
- (2) $f(I) \subset I$.
- (3) ある $0 \leq L < 1$ なる定数 L で

$$|f(x_1) - f(x_2)| \leq L|x_1 - x_2| \quad (\text{リプシッツ条件})$$

を満たすものがある。

このとき、任意の $x_0 \in I$ に対して、 $x_n = f(x_{n-1})$ ($n = 1, 2, \dots$) とすると、 $\{x_n\}$ は f の不動点に収束する。即ち、 $\lim x_n = \alpha$ とおくと、 $\alpha \in I$ で $f(\alpha) = \alpha$ 。

(証明)

- (i) 解の存在性: $f(I) \subset I$ より、 $f(a), f(b) \in I$. $g(x) = x - f(x)$ とおくと、 $f(a), f(b) \in I$ より、 $g(a) \geq 0, g(b) \leq 0$. もしも $g(a) = 0$ ならば、 $x = a$ が $f(x) = 0$ の解。もし $g(b) = 0$ ならば $x = b$ が解となる。よって $g(a) < 0, g(b) > 0$ のときを考察する必要がある。 f は連続関数より g も連続関数となり、中間値の定理 (4.2 節参照) より $g(c) = 0$ となる $c \in I$ が存在する。このとき $x = c$ が $f(x) = 0$ の解となる。
- (ii) 解の一意性: もし $f(x) = 0$ の解 c_1, c_2 が存在したとする。このとき $c_1 = c_2$ が成立することを示す。今 $c_1 \neq c_2$ とする。このとき

$$|c_1 - c_2| = |f(c_1) - f(c_2)| \leq L|c_1 - c_2| < |c_1 - c_2|$$

となり矛盾が導かれる。

- (iii) 点列の収束性:

$\alpha \in I$ が $f(x) = 0$ の解とする。すなわち、 $f(\alpha) = \alpha$. 今 $x_0 \in I$ を任意に取っ

て, $x_n = f(x_{n-1})$ とおくと,

$$\begin{aligned} |x_n - \alpha| &= |f(x_{n-1}) - f(\alpha)| \\ &\leq L|x_{n-1} - \alpha| \\ &= L|f(x_{n-2}) - f(\alpha)| \leq L^2|x_{n-2} - \alpha| \\ &\vdots \\ &\leq L^n|x_0 - \alpha| \end{aligned}$$

$0 \leq L < 1$ より, $\lim_{n \rightarrow \infty} L^n = 0$. よって $\lim_{n \rightarrow \infty} |x_n - \alpha| = 0$.



これより,

系 4.5.2. f を $I = [a, b]$ 上で定義された関数で次の条件を満たすとする.

- (1) f, f' は I 上で連続. (f は C^1 クラス)
- (2) 方程式 $f(x) = x$ は一つの解 $s \in (a, b)$ をもち, $f'(s) = 0$.

このとき, ある $d > 0$ が存在して, $x_0 \in \{x \in I \mid |x - s| < d\}$ に対して, $x_n = f(x_{n-1})$ ($n = 1, 2, \dots$) とおくと, $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = s$.

が得られる.

(証明) 方針は, 適当な閉区間 $s \in J \subset [a, b]$ と適当な定数 L ($0 \leq L < 1$) で $f(J) \subset J$ かつ任意の $x_1, x_2 \in J$ にたいして

$$|f(x_1) - f(x_2)| \leq L|x_1 - x_2|$$

が成立することを示せばよい.

$s \in (a, b)$ より, ある $d_0 > 0$ で $[s - d_0, s + d_0] \subset I$ となるものが存在する. $f'(s) = 0$ かつ f' は連続より, 適当な $0 \leq L < 1, d > 0$ ($d < d_0$) で任意の $x \in [s - d, s + d] \subset I$ にたいして $|f'(x)| \leq L$ を満たすものがある. $J = [s - d, s + d]$. よって

$$|f'(s) - f'(x)| = |f'(x)| \leq L, \quad x \in J$$

が成立する. $x_2 > x_1, x_1, x_2 \in J$ にたいして平均値の定理より

$$\begin{aligned} |f(x_1) - f(x_2)| &= |f'(\xi)||x_1 - x_2| \\ &(\xi = \theta x_1 + (1 - \theta)x_2 \in (x_1, x_2) \subset J, 0 < \theta < 1) \\ &\leq L|x_1 - x_2| \end{aligned}$$

が成立する. ($x_1 > x_2$ に対しても同様なことがしめせれる) よって, 前述の定理で $I = J$ とおけば条件 (1), (2), (3) を満たすので主張が言える.

もし, $I = [a, b]$ 上で f が C^2 - クラスかつ $f' \neq 0$ 満たしているとすれば,

$$\begin{aligned}g(x) &= x - \frac{f(x)}{f'(x)} \\g'(x) &= 1 - \frac{(f'(x))^2 - f(x)f''(x)}{(f'(x))^2}\end{aligned}$$

より,

$$g'(s) = 1 - \frac{(f'(s))^2}{(f'(s))^2} = 1 - 1 = 0$$

となるから, 上の系の条件 (1), (2) を満たすより, x_0 を s に十分近くとれば, ニュートン法での数列 $\{x_n\}$ は, s (求める解) に収束することがわかる.

4.5.2 計算量と収束度

計算量は二分法より少なくすむ. 実際, ニュートン法で $\sqrt{2}$ を求めると,
 $f(x) = x^2 - 2, f'(x) = 2x,$

$$\begin{aligned} x_k &= x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})} \\ &= x_{k-1} - \frac{1}{2} \left(x_{k-1} - \frac{2}{x_{k-1}} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(x_{k-1} + \frac{2}{x_{k-1}} \right) \end{aligned}$$

より,

$$\begin{aligned} x_1 &= 1.0, & x_2 &= 1.5, & x_3 &= 1.4166666 \\ x_4 &= 1.414215686, & x_5 &= 1.414213562, & \dots \end{aligned}$$

が得られる.

明らかに二分法より少ない計算量で 9 桁まで正しい値が求まる.

収束の速度を求めると, $\varepsilon_n = x_n - \alpha$ とおくと,

$$\begin{aligned} \varepsilon_{n+1} &= x_{n+1} - \alpha = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} - \alpha \\ &= \varepsilon_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}. \end{aligned}$$

よって, $f(x)$ のテイラー展開をつかって

$$\begin{cases} f(x_n) = f(\alpha) + \varepsilon_n f'(\alpha) + \frac{\varepsilon_n^2}{2} f''(\alpha) + \frac{\varepsilon_n^3}{6} f'''(\xi_1) \\ f'(x_n) = f'(\alpha) + \varepsilon_n f''(\alpha) + \frac{\varepsilon_n^2}{2} f'''(\xi_2) \end{cases}$$

$f(\alpha) = 0$ に注意をすると,

$$\begin{aligned} \varepsilon_{n+1} &= \varepsilon_n - \frac{\varepsilon_n f'(\alpha) + \frac{\varepsilon_n^2}{2} f''(\alpha) + \frac{\varepsilon_n^3}{6} f'''(\xi_1)}{f'(\alpha) + \varepsilon_n f''(\alpha) + \frac{\varepsilon_n^2}{2} f'''(\xi_2)} \\ &= \frac{\varepsilon_n^2}{2} \times \frac{f''(\alpha) + \varepsilon_n f'''(\xi_2) - \frac{\varepsilon_n}{3} f'''(\xi_1)}{f'(\alpha) + \varepsilon_n f''(\alpha) + \frac{\varepsilon_n^2}{2} f'''(\xi_2)} \\ &:= \frac{f''(\alpha)}{2f'(\alpha)} \varepsilon_n^2 \end{aligned}$$

これは, x_n 番目が小数点以下第 m 桁まで正しいとすると, x_{n+1} は第 $2m$ 桁まで正しい近似値であることを意味している. このことを数列 x_n が α に 2 次収束するという.

注意 2. 一般に p 次収束は, ある定数 $M > 0, k_0$ が存在して, 任意の $k \geq k_0$ にたいして,

$$\left| \frac{x_k - \alpha}{(x_{k-1} - \alpha)^p} \right| \leq M.$$

注意 3. もしも α が与えられた実関数 f の二重根ならばニュートン近似の点列は一次収束する.

仮定より $f'(\alpha) = 0$. よってテイラー展開より

$$\begin{cases} f(x_n) = \frac{\varepsilon_n^2}{2} f''(\alpha) + \frac{\varepsilon_n^3}{6} f'''(\xi_1) \\ f'(x_n) = \varepsilon_n f''(\alpha) + \frac{\varepsilon_n^2}{2} f'''(\xi_2) \end{cases}$$

よって

$$\begin{aligned} \varepsilon_{n+1} &= \varepsilon_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \\ &= \frac{\frac{\varepsilon_n^2}{2} f''(\alpha) + \frac{\varepsilon_n^3}{6} f'''(\xi_2) - \frac{\varepsilon_n^3}{6} f'''(\xi_1)}{\varepsilon_n f''(\alpha) + \frac{\varepsilon_n^2}{2} f'''(\xi_2)} \\ &:= \frac{f''(\alpha)}{2f''(\alpha)} \varepsilon_n \end{aligned}$$

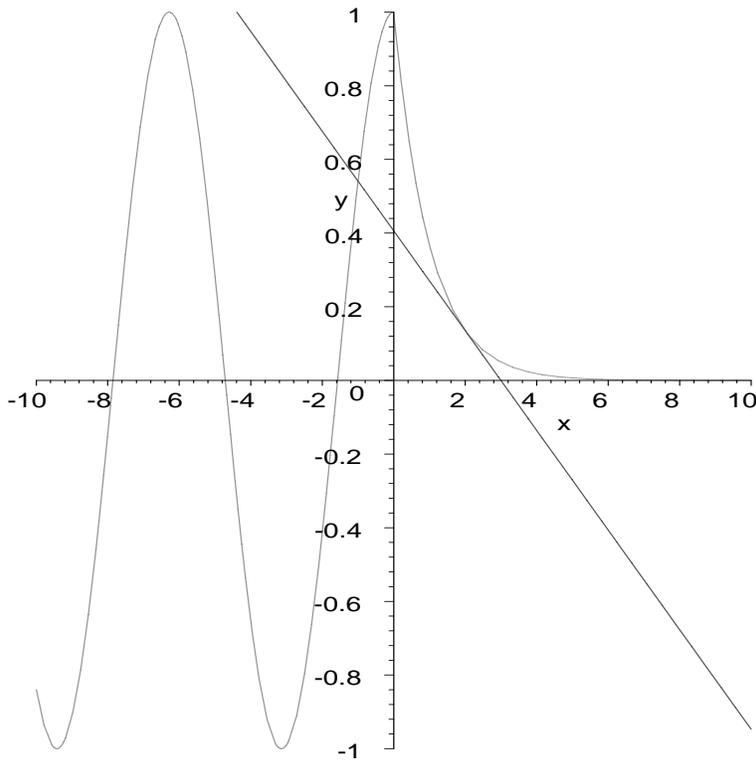
この収束を二次収束にかえる方法 (*Steffensen* の方法) があるがここでは割愛する.
([5] をみよ)

4.5.3 問題点

初期値 x_0 の取り方によってはニュートン法によって解が定まらない場合がある:

例 4.5.3.

$$y = f(x) = \begin{cases} \cos x & x < 0 \\ \exp(-x) & x \geq 0 \end{cases}$$



$x_0 = 2$ から出発すると, x_n は x 軸の正の方向へ移動するため解を求めることはできない.

4.6 距離空間における縮小写像定理

定理 4.5.1 をもう少し一般的な状況に拡張してみる. $X = \mathbb{R}$ において $\rho(x, y) = |x - y|$ とおくと ρ は, X から $\mathbb{R}_+ \cup \{0\}$ への写像で以下の 3 つの性質を満たすことが分かる.

$$(1) \rho(x, y) \geq 0 \quad x, y \in X, \rho(x, y) = 0 \leftrightarrow x = y$$

$$(2) \rho(x, y) = \rho(y, x)$$

$$(3) \rho(x, z) \leq \rho(x, y) + \rho(y, z) \quad x, y, z \in X$$

一般に上の条件を満たす ρ を集合 X の距離といい, (X, ρ) を距離空間という. X の任意の ρ に関するコーシー点列が収束点を X にもつとき X は完備な距離空間という. ここで X の点列 $\{x_n\}$ がコーシー点列であるとは任意の $\varepsilon > 0$ にたいしてある $n_0 \in \mathbb{N}$ が存在し $m, n \geq n_0$ のとき

$$\rho(x_n, x_m) < \varepsilon$$

が成立することをいう.

距離空間は位相空間論における典型的な例である. 今 2 つの距離空間 (X, ρ_X) , (Y, ρ_Y) があり, 写像 $f: X \rightarrow Y$ が与えられていたとする. このとき f が点 x_0 で連続であるとは, 任意の $\varepsilon > 0$ にたいしてある $\delta > 0$ で

$$\rho_X(x, x_0) < \delta \text{ ならば } \rho_Y(f(x_0), f(x)) < \varepsilon$$

が成立することである. (定義に基づいて確認せよ) f が X で連続であるとは, X の任意の点 x で f が連続であるときをいう.

これらの準備で次の定理が導かれる.(証明せよ)

定理 4.6.1. (X, ρ) を完備な距離空間とする. 今 $f: X \rightarrow X$ が $0 \leq r < 1$ の数が存在して

$$\rho(f(x), f(y)) \leq r\rho(x, y) \quad x, y \in X$$

を満たしているとする. このとき $f(x) = x$ となる点はただ一つ存在する.

注意 4. 上の定理で X の完備性が必要となる. (何故か?)

5 連立方程式の解法

5.1 この節の目標

線形方程式を反復法, 消去法, LU 分解法を用いて解く.
関数解析にも多少触れる.

5.2 関数解析の話題

前節で距離空間について説明したが, その (抽象的ではあるが) 例となるノルム空間, バナッハ空間について触れる.

X を実ベクトル空間としたとき (もちろん複素ベクトル空間でも同じ), それ上の写像 $\| \cdot \| : X \rightarrow \mathbb{R} \cup \{0\}$ で次の 3 つの性質を満たすものをノルムという.

$$(1) \|x\| \geq 0 \quad x \in X, \|x\| = 0 \leftrightarrow x = 0$$

$$(2) \|\alpha x\| = |\alpha| \|x\| \quad \alpha \in \mathbb{R}, x \in X$$

$$(3) \|x + y\| \leq \|x\| + \|y\| \quad x, y \in X$$

このとき X をノルム空間といい $(X, \| \cdot \|)$ と書く. $\rho(x, y) = \|x - y\|$ とおくと, ρ は X 上の距離となるのでノルム空間 $(X, \| \cdot \|)$ は距離空間である. 距離空間として完備であるとき, $(X, \| \cdot \|)$ をバナッハ空間という. バナッハ空間の典型的な例として $(\mathbb{R}^n, \| \cdot \|)$ があげられる. 但し, $x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ にたいして $\|x\| = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|$ でいれる. (注意: ノルムの入れ方は他に無限個ある. 何故か?)

関数解析の強みは, 様々な様相を見せる数学的現象の本質的なところを引っ張り上げ, 抽象的な枠組みで (美しい設定のもとで) 理論を構成し元の問題に還元することにある. もちろん具体的な (現実的な) 問題は近似の手順で解かざるを得ないがかなり強力な道具である. 興味のある方は参考図書を手にとってみればよろしい.

5.3 連立方程式に対する反復法

5.3.1 縮小写像の原理

前回紹介した縮小写像の定理の行列版について説明する.

n この未知数 x_1, x_2, \dots, x_n に対する n 個の方程式

$$x_1 = f_1(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

$$x_2 = f_2(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

$$\vdots \quad \quad \quad \vdots$$

$$x_n = f_n(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

の解を求める問題を考える. 線形代数を思い出すと,

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{pmatrix}$$

とかける. 今, $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^t$ とおくと,

$$x = f(x) = \begin{pmatrix} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{pmatrix}$$

となる.

注意: f は \mathbb{R}^n から \mathbb{R}^n へのベクトル値関数である.

\mathbb{R}^n に前節のノルムを入れる:

$$\|x\| = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|.$$

これによって \mathbb{R}^n に位相が入るが, $x_n = (x_k^{(n)})$ と書くと, $x_n \rightarrow x_0$ の必要十分条件は $x_k^{(n)} \rightarrow x_k^{(0)}$ であることに注意する.

\mathbb{R} の場合同様, \mathbb{R}^n の領域 D を D に写す写像 f が

$$x, y \in D \Leftrightarrow \|f(x) - f(y)\| \leq L\|x - y\|$$

となる定数 $L (< 1)$ をもつとき, f を D 上の縮小写像という.

ここで集合 $D \subset \mathbb{R}^n$ が領域であるとは, D は \mathbb{R}^n の開集合であり, D の任意の2点が D 内の曲線で結べることを意味する.

定理 4.6.1 の特別な場合として次が成立する.(何故か?)

定理 5.3.1. D 上の縮小写像 f に対して, 任意の $x_0 \in D$ から始めて

$$x_{n+1} = f(x_n) \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

のベクトル列を考えると, $\{x_n\}$ は $f(s) = s$ を満たす s に収束する.(つまり f の固定点に収束する)

注意 5. $s \in \overline{D}$ である.

与えられた f が縮小写像になる十分条件は,

命題 5.3.2. 領域 $D \subseteq \mathbb{R}^2$ で定義された 2 変数関数 f_1, f_2 が C^1 -クラスで, また, その閉包 \bar{D} 上で連続とする.

$$L = \max_{i=1,2} \left\{ \max_{(x,y) \in \bar{D}} \left| \frac{\partial f_i}{\partial x_1}(x,y) \right| + \max_{(x,y) \in \bar{D}} \left| \frac{\partial f_i}{\partial x_2}(x,y) \right| \right\}$$

と置いたとき, もし $L < 1$ ならば,

$$f(x) = \begin{pmatrix} f_1(x_1, x_2) \\ f_2(x_1, x_2) \end{pmatrix}$$

は縮小写像である.

証明

$$\|f(x) - f(y)\| = \max\{|f_1(x_1, x_2) - f_1(y_1, y_2)|, |f_2(x_1, x_2) - f_2(y_1, y_2)|\}.$$

2 変数の平均値の定理より, ある ξ_1 ($x_1 \leq \xi_1 \leq y_1$), ξ_2 ($x_2 \leq \xi_2 \leq y_2$) が存在して, ($(x_1 \leq y_1, x_2 \geq y_2)$, ($x_1 \geq y_1, x_2 \leq y_2$), ($x_1 \leq y_1, x_2 \leq y_2$) に対しても同じようにすればよい)

$$f_1(x_1, x_2) - f_1(y_1, y_2) = (x_1 - y_1) \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(\xi_1, \xi_2) + (x_2 - y_2) \frac{\partial f_1}{\partial x_2}(\xi_1, \xi_2)$$

より,

$$|f_1(x_1, x_2) - f_1(y_1, y_2)| \leq \left\{ \max_{(x,y) \in \bar{D}} \left| \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(x,y) \right| + \max_{(x,y) \in \bar{D}} \left| \frac{\partial f_1}{\partial x_2}(x,y) \right| \right\} \times \max\{|x_1 - y_1|, |x_2 - y_2|\}$$

となる. f_2 の関して同様に言えるので,

$$\|f(x) - f(y)\| \leq L \|x - y\|$$

がいえる. ♠

注意 6. 閉領域 \bar{D} が \mathbb{R}^n 内のコンパクトな集合ならば (つまり有界閉集合) それ上の実数値連続関数は \bar{D} 上で最大値・最小値をとる.(何故か?)

5.3.2 ニュートン近似

2 変数 $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$ にたいして $f(x) = 0$ の解を求める問題を考える. 1 変数のときのニュートン近似法は, $f'(x) \neq 0$ のとき,

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

の漸化式で定義された数列 $\{x_n\}$ の極限を求めた. これの行列版を考えると, $f'(x) \neq 0$ に対応する条件として, ヤコビ行列 $J(x)$

$$J(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(x_1, x_2) & \frac{\partial f_1}{\partial x_2}(x_1, x_2) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}(x_1, x_2) & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}(x_1, x_2) \end{pmatrix}$$

の行列式 $\det(J(x)) \neq 0$ を考える.

$g(x) = x - [J(x)]^{-1}f(x)$ となるベクトル値関数を考えると, 1変数の場合と同様に, $s \in \mathbb{R}^2$ を $g(x)$ の固定点とすると,

$$\begin{aligned} s &= g(s) = s - [J(s)]^{-1}f(s) \\ 0 &= [J(s)]^{-1}f(s). \end{aligned}$$

$[J(s)] \neq 0$ より, $f(s) = 0$ がえられる. 故に, 前節の命題により, $g(x)$ の L が 1 より小さくとれることを言えばよい.

$$g(x) = \begin{pmatrix} g_1(x_1, x_2) \\ g_2(x_1, x_2) \end{pmatrix}, J(x)^{-1} = \begin{pmatrix} h_{11}(x_1, x_2) & h_{12}(x_1, x_2) \\ h_{21}(x_1, x_2) & h_{22}(x_1, x_2) \end{pmatrix} \text{ と書くと,}$$

$$\begin{pmatrix} h_{11}(x_1, x_2) & h_{12}(x_1, x_2) \\ h_{21}(x_1, x_2) & h_{22}(x_1, x_2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\frac{\partial g_1(x)}{\partial x_1} = 1 - \frac{\partial h_{11}}{\partial x_1} f_1 - h_{11} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} - \frac{\partial h_{12}}{\partial x_1} f_2 - h_{12} \frac{\partial f_2}{\partial x_1}$$

$$= 1 - 1 - \frac{\partial h_{11}}{\partial x_1} f_1 - \frac{\partial h_{12}}{\partial x_1} f_2$$

$$= -\frac{\partial h_{11}}{\partial x_1} f_1 - \frac{\partial h_{12}}{\partial x_1} f_2$$

$$\frac{\partial g_1(x)}{\partial x_2} = 1 - \frac{\partial h_{21}}{\partial x_2} f_1 - h_{21} \frac{\partial f_1}{\partial x_2} - \frac{\partial h_{22}}{\partial x_2} f_2 - h_{22} \frac{\partial f_2}{\partial x_2}$$

$$= 1 - 1 - \frac{\partial h_{21}}{\partial x_2} f_1 - \frac{\partial h_{22}}{\partial x_2} f_2$$

$$= 1 - \frac{\partial h_{21}}{\partial x_2} f_1 - \frac{\partial h_{22}}{\partial x_2} f_2,$$

$$\frac{\partial g_1(x)}{\partial x_2} = -\frac{\partial h_{1,1}}{\partial x_1} f_1 - \frac{\partial h_{1,2}}{\partial x_1} f_2$$

$$\frac{\partial g_2(x)}{\partial x_1} = -\frac{\partial h_{2,1}}{\partial x_1} f_1 - \frac{\partial h_{2,2}}{\partial x_1} f_2$$

より,

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial x_1} & \frac{\partial g_1}{\partial x_2} \\ \frac{\partial g_2}{\partial x_1} & \frac{\partial g_2}{\partial x_2} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \frac{\partial h_{11}}{\partial x_1} & \frac{\partial h_{12}}{\partial x_1} \\ \frac{\partial h_{21}}{\partial x_1} & \frac{\partial h_{22}}{\partial x_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}.$$

よって, もし $f(s) = 0$ となる $s \in \mathbb{R}^2$ が存在すれば, $g(s)$ のヤコビ行列も 0 をとるより, 適当な s の近傍で L は 1 より小さくとれる.

故に, $x_{n+1} = x_n - [J(x_n)]^{-1}f(x_n)$ から作られるベクトル列 $\{x_n\}$ は s に収束する.

2変数の場合のニュートン法のアルゴリズムは以下の通りになる:

アルゴリズム 5.3.3. $f(z)$ ($z = (x, y)$) が領域 D 上で C^1 クラスで, また, その閉包 \bar{D} 上で連続とする. また, ヤコビ行列 $J(z)$ の行列式 $\det(J(x))$ が 0 でないとする. さらに $f(x) = 0$ の解 α が D 内にあるとする.

- (1) $f(z) = 0$ の解 α の近くに初期値 $z_0 = (x_0, y_0)$ を選ぶ.
 (2) $z_k := z_{k-1} - [J(z_{k-1})]^{-1} f(z_{k-1})$ ($z_k = (x_k, y_k)$) の漸化式を構成する.
 (3) 定められた精度 ε (許容誤差) にたいして
 (i) $\|z_k - z_{k-1}\| = \max\{|x_k - x_{k-1}|, |y_k - y_{k-1}|\} < \varepsilon$ ならば, z_k を近似解として採用.
 (ii) $\|z_k - z_{k-1}\| \geq \varepsilon$ ならば k を $k + 1$ とおきかえて (2) から繰り返す.

例 5.3.4. 次の方程式を満たす $(0, 0)$ 以外の解をニュートン近似で求めよ. 但し, 許容誤差 10^{-3} とする.

$$\begin{cases} f(x, y) = x - x^2 - y^2 = 0 \\ g(x, y) = y - y^2 - x^2 = 0 \end{cases}$$

(解答) ヤコビアン $J(x, y)$ は,

$$J(x, y) = \begin{pmatrix} 1 - 2x & -2y \\ -2x & 1 - 2y \end{pmatrix}$$

より

$$J(x, y)^{-1} = \frac{1}{1 - 2y - 2x} \begin{pmatrix} 1 - 2y & 2y \\ 2x & 1 - 2x \end{pmatrix}$$

となる.

よって

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} x_{n+1} \\ y_{n+1} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} x_n \\ y_n \end{pmatrix} - J(x_n, y_n)^{-1} \begin{pmatrix} f(x_n, y_n) \\ g(x_n, y_n) \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{1 - 2x_n - 2y_n} \begin{pmatrix} -x_n^2 - y_n^2 \\ -x_n^2 - y_n^2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$(x_0, y_0) = (1, 1)$ から点列を構成すると,

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0.6667 \\ 0.6667 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0.5338 \\ 0.5338 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} x_3 \\ y_3 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0.5020 \\ 0.5020 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} x_4 \\ y_4 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.5 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} x_5 \\ y_5 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.5 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\left\| \begin{pmatrix} x_4 \\ y_4 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} x_5 \\ y_5 \end{pmatrix} \right\| < 10^{-3}$$

より, 近似解は $(0.5, 0.5)$ となる. ♠

5.4 連立1次方程式の反復法

連立方程式は消去法で解くことができるが(次節で説明)、常微分方程式の境界値問題や偏微分方程式の数値解法などでは、非常に大きな元数の連立1次方程式を解くことがあり、さらにその係数の行列が0要素が多いものが表れ、反復法の方が適当であるときがある。

5.4.1 ヤコビ法

連立方程式を行列を用いて $Ax = b$ と表したとき,

$$A = D + E + F$$

と分解する。但し、 D は対角部分、 E は下半部分、 F は上半部分をとったものとする。これを用いて先の行列方程式を書き換えると,

$$\begin{aligned} (D + E + F)x &= b \\ Dx &= -(E + F)x + b \\ x &= -D^{-1}(E + F)x + D^{-1}b \end{aligned}$$

となる。ここで、 D が逆行列をもつと仮定した。この方程式からベクトル列の漸化式を

$$x_{k+1} = -D^{-1}(E + F)x_k + D^{-1}b$$

と定義すると、このベクトル列が収束すればもとの行列式の解が求まることがわかる。 $D^{-1}b$ は定ベクトルより、5.3.1節の縮小写像の原理より、行列 $G = D^{-1}(E + F)$ が縮小写像であれば十分である。つまり、

$$\begin{aligned} \|Gx - Gy\| &\leq L\|x - y\| \\ \|G(x - y)\| &\leq L\|x - y\| \end{aligned}$$

を満たす $L < 1$ が存在することを示せばよい。(G の線形性に注意)

$G = [g_{i,j}]$ と書くと、

$$\begin{aligned} \|Gx\| &= \max_i \left| \sum_{j=1}^n g_{i,j}x_j \right| \\ &\leq \max_i \left\{ \sum_{j=1}^n |g_{i,j}| |x_j| \right\} \\ &\leq \max \left\{ \sum_{j=1}^n |g_{i,j}| \times \max_j |x_j| \right\} \\ &= \left\{ \max_i \sum_{j=1}^n |g_{i,j}| \right\} \|x\| \end{aligned}$$

となるより、 $L = \left\{ \max_i \sum_{j=1}^n |g_{i,j}| \right\}$ が 1 より小さければよい。
これをヤコビの方法という。今、 $A = [a_{i,j}]$ から出発すれば、

$$G = - \begin{pmatrix} 0 & \frac{a_{1,2}}{a_{1,1}} & \cdots & \frac{a_{1,n}}{a_{1,1}} \\ \frac{a_{2,1}}{a_{2,2}} & 0 & \cdots & \frac{a_{2,n}}{a_{2,2}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{a_{n,1}}{a_{n,n}} & \frac{a_{n,2}}{a_{n,n}} & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

であり、漸化式は

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{a_{1,1}} \left\{ b_1 - \sum_{j \neq 1} a_{1,j} x_j^{(k)} \right\} \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} = \frac{1}{a_{n,n}} \left\{ b_n - \sum_{j \neq n} a_{n,j} x_j^{(k)} \right\} \end{cases}$$

これから次の条件が収束の十分条件であることがわかる。

定理 5.4.1. n 次の行列 $A = [a_{i,j}]$ が

$$(*) \quad |a_{k,k}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}} |a_{k,j}|$$

($k = 1, 2, \dots, n$) を満たすとき、ヤコビの方法は勝手な x_0 から出発して構成されたベクトル列 $\{x_k\}$ は収束する。

証明 練習問題.

5.4.2 ガウス・ザイデル法

ヤコビ法と同様に行列方程式 $Ax = b$ が与えられたとき、 $A = D + E + F$ と分解し、

$$\begin{aligned} (D + E + F)x &= b \\ (D + E)x &= -Fx + b \\ x &= -(D + E)^{-1}Fx + (D + E)^{-1}b \end{aligned}$$

この方程式からベクトル列の漸化式を

$$x_{k+1} = -(D + E)^{-1}Fx_k + (D + E)^{-1}b$$

と定義し、このベクトル列が収束するように初期ベクトルを選べばよい。 D が逆行列を持てば $(D + E)$ は逆行列を持つが (何故か?)、その計算は難しい。 $(D + E)x_{k+1} =$

$-Fx_k + b$ から漸化式の成分表示を導くと,

$$\begin{cases} x_1^{(k)} = \frac{1}{a_{1,1}} \{b_1 - \sum_{j>1} a_{1,j} x_j^{(k-1)}\} \\ x_2^{(k)} = \frac{1}{a_{2,2}} \{b_2 - a_{2,1} x_1^{(k)} - \sum_{j>2} a_{2,j} x_j^{(k-1)}\} \\ \vdots \\ x_n^{(k)} = \frac{1}{a_{n,n}} \{b_n - \sum_{j=1}^{n-1} a_{n,j} x_j^{(k)}\} \end{cases}$$

となり, ヤコビ法より収束の速度が速いことが想像できると思う. 実際早い. またヤコビ法同様, 先の行列 A の (*) 条件が収束の十分条件である.

5.5 ガウスの消去法

5.5.1 基本的事項

今, 連立一次方程式

$$\begin{cases} a_{1,1}x_1 + a_{1,2}x_2 + \cdots + a_{1,n}x_n = b_1 \\ a_{2,1}x_1 + a_{2,2}x_2 + \cdots + a_{2,n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{n,1}x_1 + a_{n,2}x_2 + \cdots + a_{n,n}x_n = b_n \end{cases}$$

を解こうと試みる. まず, 線形代数を利用して解答するのが自然であろう. つまり上の方程式を下記の行列方程式に変換する:

$$Ax = b,$$

ここで, $A = (a_{i,j})$, $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^t$, $b = (b_1, b_2, \dots, b_n)^t$ (t はトランスポーズ).

A が正則のとき, つまり, A が逆行列 A^{-1} を持つとき,

$$\begin{aligned} A^{-1}(Ax) &= A^{-1}b \\ x &= A^{-1}b. \end{aligned}$$

このとき, クラメルの公式より,

$$x_j = \frac{\det(A_j)}{\det(A)}$$

$$A_j = \begin{pmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,j-1} & b_1 & a_{1,j+1} & \cdots & a_{1,n} \\ \vdots & & \ddots & & & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & & & & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & & & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & & & & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & \cdots & a_{n,j-1} & b_n & a_{n,j+1} & \cdots & a_{n,n} \end{pmatrix}$$

これから解 x_1, x_2, \dots, x_n を求めるには,

$$\begin{aligned} x_n &= \frac{d_n}{c_{n,n}} \\ x_{n-1} &= \frac{1}{c_{n-1,n-1}} (d_{n-1} - c_{n-1,n}x_n) \\ &\vdots \\ x_i &= \frac{1}{c_{i,i}} \left(d_i - \sum_{j=i+1}^n c_{i,j}x_j \right) \\ &\vdots \\ x_1 &= \frac{1}{a_{1,1}} \left(b_1 - \sum_{j=2}^n a_{1,j}x_j \right) \end{aligned}$$

とすればよい. これをガウス法の後進代入という. この場合乗除算に必要な計算量は

$$\sum_{k=1}^{n-1} \sum_{j=k+1}^n 1 = \frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{2}n$$

なので, 総乗除算計算数は

$$\frac{1}{3}n^3 + n^2 - \frac{4}{3}n$$

となり, これはクラメルの公式を直接用いたときより少なくすむ.

例 5.5.2. 次の方程式を消去法で解こう. (直接解くのは簡単であるがガウスの消去法を理解するには良い練習である)

$$\begin{cases} x + 2y + z = 3 \\ -x + y - z = -6 \\ 2x + 3y = 1 \end{cases}$$

これを行列で表現すると,

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ -1 & 1 & -1 \\ 2 & 3 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ -6 \\ 1 \end{pmatrix}$$

与えられた行列の拡大行列を基本変形していくと以下の通りになる:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 1 & 3 \\ -1 & 1 & -1 & -6 \\ 2 & 3 & 0 & 1 \end{array} \right) \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 1 & 3 \\ 0 & 3 & 0 & -3 \\ 0 & -1 & -2 & -5 \end{array} \right)$$

$$\rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 1 & 3 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & -2 & -5 \end{array} \right)$$

$$\rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 1 & 3 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -2 & -6 \end{array} \right)$$

再び, 行列式に書き換えて

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ -1 \\ -6 \end{pmatrix}$$

よって, 下から $z = 3$, $y = -1$, $x = 3 - 2y - z = 2$ となる. ♠

5.5.3 LU 分解

与えられた行列 A を下半行列 L , 上半行列 U を用いて

$$A = LU$$

と分解することを LU 分解という. 特に,

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{2,1} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ l_{n,1} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & u_{1,3} & \cdots & u_{1,n} \\ 0 & u_{2,2} & u_{2,3} & \cdots & u_{2,n} \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & u_{n,n} \end{pmatrix}$$

とする.

$n = 3$ のとき求め方を検討しよう.

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,3} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} \\ a_{3,1} & a_{3,2} & a_{3,3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{2,1} & 1 & 0 \\ l_{3,1} & l_{3,2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & u_{1,3} \\ 0 & u_{2,2} & u_{2,3} \\ 0 & 0 & u_{3,3} \end{pmatrix}$$

の両辺の行列の (i, j) 成分を比較して

$$\begin{aligned}
 (1) \quad & u_{1,1} = a_{1,1}, & u_{1,2} = a_{1,2}, u_{1,3} = a_{1,3} \\
 & l_{2,1} = \frac{a_{2,1}}{u_{1,1}}, & l_{3,1} = \frac{a_{3,1}}{u_{1,1}} \\
 (2) \quad & u_{2,2} = a_{2,2} - l_{2,1}u_{1,2} \\
 & u_{2,3} = a_{2,3} - l_{3,1}u_{1,2} \\
 & l_{3,2} = a_{3,2} - l_{3,1}u_{1,2} \\
 (3) \quad & u_{3,3} = a_{3,3} - l_{3,1}u_{1,3} - l_{3,2}u_{2,3}
 \end{aligned}$$

このことから

(1) U はガウスの消去法後の行列と同じである.

実際 LU 分解をするときガウスの消去法と同じ方法で変形していき最終的な形は

$$\begin{pmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & u_{1,3} & \cdots & u_{1,n} \\ l_{2,1} & u_{2,2} & u_{2,3} & \cdots & u_{2,n} \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ l_{n,1} & \cdots & & l_{n,n-1} & u_{n,n} \end{pmatrix},$$

となり, そのあとで求め得た行列を L, U に分けて表示する.

(2) $A = LU$ に対して, A の行列式は簡単に求められる. 実際, $\det(L) = 1$ より,

$$\det(A) = \det(U) = u_{1,1}u_{2,2} \cdots u_{n,n}.$$

(何故か?)

LU 分解をすると, 連立方程式の解も簡単に求められる. 実際, $Ax = b$ は

$$\begin{cases} Ly = b \\ Ux = y \end{cases}$$

と同値である. つまり 第 1 式から y を求め, 次に第 2 式から x を求めればよい. L は下半行列より,

$$\begin{aligned}
 y_1 &= b_1 \\
 y_2 &= b_2 - l_{2,1}y_1 \\
 &\vdots \\
 y_i &= b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{i,k}y_k \\
 &\vdots \\
 y_n &= b_n - \sum_{k=1}^{n-1} l_{n,k}y_k
 \end{aligned}$$

と求められ, 次に

$$\begin{aligned} x_n &= \frac{1}{u_{n,n}} y_n \\ x_{n-1} &= \frac{1}{u_{n-1,n-1}} (y_{n-1} - u_{n-1,n} x_n) \\ &\vdots \\ x_i &= \frac{1}{u_{i,i}} (y_i - \sum_{k=i+1}^n u_{i,k} x_k) \\ &\vdots \\ x_1 &= \frac{1}{u_{1,1}} (y_1 - \sum_{k=2}^n u_{1,k} x_k) \end{aligned}$$

と解を求める.

例 5.5.3. 例 2.1 を, LU 分解を用いて解いてみよう.

行列 $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ -1 & 1 & -1 \\ 2 & 3 & 0 \end{pmatrix}$ の LU 分解を求めてみると,

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ -1 & 1 & -1 \\ 2 & 3 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & & & & & \\ & 2 & & & & \\ & & & & & \\ -1 & & & 1 & & -1 \\ & & & & & \\ 2 & & & & 3 & 0 \end{array} \right)$$

$$\rightarrow \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 2 & 1 & & & \\ -1 & 3 & 0 & & & \\ & & & & & \\ 2 & & & -1 & & -2 \end{array} \right)$$

$$\rightarrow \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 2 & 1 & & & \\ -1 & 3 & 0 & & & \\ & & & & & \\ 2 & -\frac{1}{3} & & & -2 & \end{array} \right)$$

故に,

$$\begin{aligned} A &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 2 & -\frac{1}{3} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \\ &= LU \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 2 & -\frac{1}{3} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ -6 \\ 1 \end{pmatrix}$$

で,

$$U \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$$

とおくと,

$$L \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ -6 \\ 1 \end{pmatrix}$$

から, $a = 3, b = -3, c = -6$ となる. よって,

$$U \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ -6 \\ -6 \end{pmatrix}$$

より, $z = 3, y = -1, x = 2$ が求められる.

5.6 LU 分解の応用

与えられた行列式を求めるとき LU 分解は役に立つ.

例 5.6.1.

$$A = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} & 0 \\ \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 4 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 6 \\ 3 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 6 \\ 2 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 6 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

の行列式を求めよう. ここで

$$\binom{n}{m} = nCm = \frac{n!}{m!(n-m)!}$$

$(n \geq m)$ を意味する.

(解)

これより

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix} & 1 & 0 \\ \begin{pmatrix} 5 \\ 2 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 5 \\ 1 \end{pmatrix} & 1 \end{pmatrix}$$

$$U = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} & 0 \\ 0 & \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 4 \\ 0 \end{pmatrix} \\ 0 & 0 & \begin{pmatrix} 5 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

よって $\det A = \det L \det U = 1 \times 2 = 2$.

計算の途中で

$$2 \begin{pmatrix} 2i-1 \\ i-1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2i \\ i \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 2i-1 \\ i-j \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2i-1 \\ i-j+1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2i \\ i-j+1 \end{pmatrix}$$

を使っている.



同じような議論で

$$A = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 4 \\ 0 \end{pmatrix} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \begin{pmatrix} 2n \\ n \end{pmatrix} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \begin{pmatrix} 2n \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

は, $\det A = 2$ をもつことを LU 分解から示せる.

6 関数近似と補間法

6.1 この節の目標

与えられた n 個のデータ $(t_1, f(t_1)), \dots, (t_n, f(t_n))$ からその間のデータを予測することが補間である。そのためには、データがある関数で近似されるあるいは関数で実現できることを期待して補間する。

近似の方法として簡単なヒルベルト空間論を用いての多項式での近似と与えられたデータを補う多項式での補間をするラグランジェ補間法に触れる。

6.2 ヒルベルト空間論

5.2 節で導入したノルムに関する内積について触れる。

X を実ベクトル空間としたとき、写像 $\langle, \rangle: X \times X \rightarrow \mathbb{R}$ が次の 3 条件を満たすとき内積という。

- (1) $\langle x, x \rangle \geq 0 \quad \forall x \in X, \langle x, x \rangle = 0 \Leftrightarrow x = 0.$
- (2) $\langle \alpha x, y \rangle = \alpha \langle x, y \rangle \quad \forall x, y \in X$
- (3) $\langle x + y, z \rangle = \langle x, z \rangle + \langle y, z \rangle \quad \forall x, y, z \in X$
- (4) $\langle x, y \rangle = \langle y, x \rangle \quad \forall x, y \in X$

$\|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle}$ と定義すると、 $\| \cdot \|$ は X 上のノルムになる。(確かめよ) X が $\| \cdot \|$ から導入された距離に関して完備であるときヒルベルト空間という。

我々がここで使うのは \mathbb{R}^n 上の良く知られた内積である。すなわち $x = (x_1, \dots, x_n), y = (y_1, \dots, y_n) \in \mathbb{R}^n$ にたいして

$$\langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^n x_i y_i$$

と定義する。ここで大事な概念は直交である。2つのベクトル $x, y \in \mathbb{R}^n$ が直交するとは $\langle x, y \rangle = 0$ となることである。任意の(可分な)完備なヒルベルト空間 X は、可算個の長さ1のベクトル $\{x_i\}_{i=1}^{\infty}$ ($\|e_i\| = 1$) と適当な実数列 $\{\alpha_i\}_{i=1}^{\infty}$ で表現出来る。(Parsevalの等式) すなわち

$$x = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i e_i.$$

$X = \mathbb{R}^n$ のときは、 $e_i = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$ (i 番目で1をとる) ($1 \leq i \leq n$) としてとれる。だから次元は n である。次は大事な性質。

定理 6.2.1. M をヒルベルト空間 X の閉部分空間とする。このとき任意の $x \in X$ にたいして x と M との距離 $d(x, M)$ をあてるベクトル y がただ1つ存在する。つまり、 y は $d(x, M) = \|x - y\|$ を満たす x から M への垂線の足である。

一般に距離は、 $X = \mathbb{R}^n$ の場合を踏まえて $d(x, M) = \inf_{z \in M} \|x - z\|$ として定義する。

(証明) $x \in M$ の時は、 $d(x, M) = 0$ となり $y = x$ を取ればよい。もし他の $z \in M$ で $\|x - z\| = 0$ となるとノルムの性質 (1) より $x - z = 0$ となり $x = z$ が導ける。よって以下 $x \notin M$ とする。

\inf の定義より $\alpha = d(x, M)$ とおくと、あるベクトル列 $\{y_n\} \subset M$ で $\lim \|x - y_n\| = \alpha$ となるものが存在する。このとき

$$\begin{aligned} \|y_n - y_m\|^2 &= \|(x - y_m) - (x - y_n)\|^2 \\ &= \langle (x - y_m) - (x - y_n), (x - y_m) - (x - y_n) \rangle \\ &= 2(\|x - y_m\|^2 + \|x - y_n\|^2) - \|x - y_m\|^2 - \|x - y_n\|^2 \\ &\quad - \langle x - y_m, x - y_n \rangle - \langle x - y_n, x - y_m \rangle \\ &= 2(\|x - y_m\|^2 + \|x - y_n\|^2) - \|(x - y_m) + (x - y_n)\|^2 \\ &= 2(\|x - y_m\|^2 + \|x - y_n\|^2) - 4\|x - \frac{y_m + y_n}{2}\|^2 \\ &\leq 2(\|x - y_m\|^2 + \|x - y_n\|^2) - 4 \times \frac{1}{2}(\|x - y_m\| + \|x - y_n\|) \\ &\leq 2(\|x - y_m\|^2 + \|x - y_n\|^2) - 2 \times 2\alpha \\ &\rightarrow 0 \quad (n, m \rightarrow \infty) \end{aligned}$$

よって $\{y_n\}$ はコーシー列である。 X は完備なのであるベクトル $y \in X$ が存在して $\|y_n - y\| \rightarrow 0$ ($n \rightarrow \infty$)。ところで M は閉集合なので $y \in M$ である。これが求める y である。実際

$$\|x - y\| = \lim_{n \rightarrow \infty} \|x - y_n\| = \alpha = d(x, M).$$

一意性は、もし他の $y' \in M$ で $\|x - y'\| = d(x, M)$ とする。上と同じ計算より

$$\begin{aligned} \|y - y'\|^2 &= 2(\|x - y\|^2 + \|x - y'\|^2) - 4\|x - \frac{y + y'}{2}\|^2 \\ &\leq 2(\alpha^2 + \alpha^2) - 4\alpha^2 = 0. \end{aligned}$$



実は上のベクトル $x - y$ は M の任意のベクトル z と直交する。(何故か?)

一般のバナッハ空間の場合は上のようなことは期待できない。

6.3 関数近似

$[a, b]$ 上の連続関数からなる空間に”近さ”を表す物差し (ノルム) を入れることを考える。(5.2 節参照)

$f, g : [a, b]$ 上の連続関数,

(1)

$$\|f - g\|_\infty = \max_{x \in [a, b]} \{|f(x) - g(x)|\}$$

(2)

$$\|f - g\|_2 = \left(\int_a^b |f(x) - g(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}}$$

このとき, $(C[a, b], \|\cdot\|_\infty)$ はバナッハ空間になるが, $(C[a, b], \|\cdot\|_2)$ はバナッハ空間にならない. (何故か?)

今与えられている連続関数 f に対して, その f に計算可能な関数 (例えば多項式) で近似する事を考える. つまり, $g_j(x) = x^{j-1}$ とおいて $M = \{ \sum_{j=1}^n c_j g_j(x) \mid c_j \in \mathbf{R} \}$ なる n 次元線形部分空間を考えたとき,

$$\begin{aligned} \min\{\|f - g\|_\infty \mid g \in M\} \\ \min\{\|f - g\|_2 \mid g \in M\} \end{aligned}$$

を与えるような関数を最良近似, ミニマックス近似関数という. 特に, $\|\cdot\|_2$ に関するミニマックス関数を最小 2 乗関数という.

例えば, $C[-\pi, \pi]$ において, 一次独立な関数 $\{1, \sin nx, \cos nx\}_{n=1}^\infty$ に対して,

$$M = \left\{ a_0 + \sum_{k=1}^n a_k \cos kx + b_k \sin kx \mid a_i, b_i \in \mathbf{R} \right\}$$

を考えると, M は $2n + 1$ 次元ベクトル空間となる. このとき $f \in C[-\pi, \pi]$,

$$\min\{\|f - g\|_2 \mid g \in M\} = \|f - g_0\|_2$$

となる g_0 が存在する. (任意の有限次元部分空間は閉部分空間である. 何故か?) 特に,

$$\begin{aligned} g_0(x) &= \frac{1}{2}a_0 + \sum_{k=1}^n a_k \cos kx + b_k \sin kx, \\ a_k &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos kx dx \\ b_k &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \sin kx dx \end{aligned}$$

で与えられる. (これを f の第 n 項までのフーリエ級数という)

現実には, 有限個のデータ $(x_1, f(x_1)), \dots, (x_l, f(x_l))$ から

$$\sum_{i=1}^l |f(x_i) - g(x_i)|, \quad \sum_{i=1}^l |f(x_i) - g(x_i)|^2$$

が最小になるように $g(x)$ を探す.

例 6.3.1. データが 2 つ与えられている場合, 最初 2 乗近似 1 次関数はその 2 点を通る直線.

証明.

今, $(x_1, f(x_1)), (x_2, f(x_2))$ が与えられているとする.

これを行列表示すると

$$A \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & \cdots & x_1^n \\ 1 & x_2 & \cdots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_m & \cdots & x_m^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$$

c_0, c_1, \dots, c_n を決定するために次のベクトル空間 M を考える.

$$M = \left\{ \left(\begin{pmatrix} 1 & x_1 & \cdots & x_1^n \\ 1 & x_2 & \cdots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_m & \cdots & x_m^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} \mid \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} \right\} \subset \mathbb{R}^n.$$

状況は点 $b = (f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n))$ からベクトル空間 M への垂線の足の元 $Ac = A(c_0, c_1, \dots, c_n)$ を求めることである. M がベクトル $(1, 1, \dots, 1), (x_1, x_2, \dots, x_m), \dots, (x_1^n, x_2^n, \dots, x_m^n)$ で張られること (行列 A の列ベクトル) と $b - Ac$ が M の任意のベクトルと直交することに気をつければ,

$$A^t(b - Ac) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_1 & x_2 & \cdots & x_m \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_1^n & x_2^n & \cdots & x_m^n \end{pmatrix} (b - Ac)$$

が成立する. ここで A^t は A の転置行列. よって

$$A^t Ac = A^t b$$

でこれが上の定理の主張の式を導いている. ♠

例 6.3.3. 次のデータが与えられているとする:

x_k	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0
$f(x_k)$	2.0	5.0	4.0	6.0	9.0

このとき、最小 2 乗 1 次多項式 $g(x)$ を求めよ.

(解答例)

x_k	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0
f_k	2.0	5.0	4.0	6.0	9.0
x_k^2	0.0	1.0	4.0	9.0	16
$f_k x_k$	0.0	5.0	8.0	18.0	36.0

故に、次の連立方程式を解けばよい.

$$\begin{cases} 5.0c_0 + 10.0c_1 = 26.0 \\ 10.0c_0 + 30.0c_1 = 67.0 \end{cases}$$

ガウスの消去方を用いると、

$$\left(\begin{array}{cc|c} 5.0 & 10.0 & 26.0 \\ 10.0 & 30.0 & 67.0 \end{array} \right) \longrightarrow \left(\begin{array}{cc|c} 5.0 & 10.0 & 26.0 \\ 0 & 10.0 & 15.0 \end{array} \right)$$

故に、 $c_0 = 2.2$, $c_1 = 1.5$ となり求める最小 2 乗 1 次多項式 $g(x)$ は

$$g(x) = 1.5x + 2.2$$



6.4 ラグランジェの補間公式

$n + 1$ 個の異なる点 x_0, x_1, \dots, x_n における $f(x)$ の値 $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)$ がわかっているとき, $g(x_j) = f(x_j)$ となる関数 $g(x)$ を $f(x)$ の補間関数という. 特に, $g(x)$ が多項式するとき, $g(x)$ を補間多項式という.

今, $f(x)$ の補間 n 次多項式を

$$p_n(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n$$

とおくと, $p_n(x_j) = f(x_j)$ ($j = 0, 1, \dots, n$) より

$$\begin{cases} a_0 + a_1x_0 + \cdots + a_nx_0^n = f(x_0) \\ \vdots \\ a_0 + a_1x_n + \cdots + a_nx_n^n = f(x_n) \end{cases}$$

行列表示をすると,

$$\begin{pmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ \vdots \\ f(x_n) \end{pmatrix}$$

となる.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n \end{pmatrix}$$

は有名なヴァンデモンドの行列で

$$\det(A) = \prod_{i>j} (x_i - x_j) \neq 0$$

であるから, (a_0, a_1, \dots, a_n) は一意的に定まる.

注意 7. $\det(A) = \prod_{i>j} (x_i - x_j) \neq 0$ は LU 分解を用いれば示せる. (やってみよう!)

注意 8. データが $n + 1$ 個与えられているとき, k 次補間多項式 ($k < n$) は一般には存在しない. また存在したとしても一意的とは限らない.

定理 6.4.1 (ラグランジェの補間公式). $n + 1$ 個の点 x_0, x_1, \dots, x_n における $f(x)$ の値 $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)$ が与えられているとき, n 次元補間多項式 $p_n(x)$ は

$$\begin{aligned} p_n(x) &= \frac{(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)\cdots(x_0-x_n)} f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)\cdots(x-x_n)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)\cdots(x_1-x_n)} f(x_1) \\ &+ \cdots + \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})}{(x_n-x_0)(x_n-x_1)\cdots(x_n-x_{n-1})} f(x_n) \end{aligned}$$

となる.

証明.

$p(x_0) = f(x_0), p(x_1) = f(x_1), \dots, p(x_n) = f(x_n)$ から成立することがわかる. ♠

例 6.4.2.

x_k	0	1	3
$f(x_k)$	10.00	9.05	7.41

このとき, ラグランジェの補間多項式を用いて $f(2)$ の近似値を求めよ.

解

ラグランジェの補間公式より

$$\begin{aligned} & \frac{(2-1)(2-3)}{(-1)(-3)} \times 10.00 + \frac{(2-0)(2-3)}{(1)(1-3)} \times 9.05 + \frac{2 \times 1}{3 \times 2} \times 7.41 \\ &= -\frac{10.00}{3} + 9.05 + \frac{7.41}{3} \\ &= -\frac{2.59}{3} - 9.05 = -0.8633 + 9.05 = 8.1867 := 8.19 \end{aligned}$$

♠

注意 9. 問題が小数点以下 2 位で表示されているので, 第 3 位を四捨五入して近似値を求める.

注意 10. ラグランジェの補間多項式は, 低次元の場合はうまく働くが, 高次元の場合は大きな誤差を伴うことがある. 例えば, $f(x) = \frac{1}{1+25x^2}$ で, $x_0 = -1.0, x_1 = -0.8, \dots, x_{10} = 1.0$ と $[-1, 1]$ を 10 等分したデータが与えられたとき, ラグランジェ補間多項式 $g(x)$ を求め, $|f(x) - g(x)|$ の差をグラフで見ると次のページのようになり, $-1, 1$ のまわりで $n \rightarrow \infty$ のとき発散することがわかる. (これをルンゲ現象 (Runge Phenomina) という)

このような誤差をさけるため, スプライン補間というものがある. スプライン補間は分岐点の間をなるべくなめらかな曲線で結んでいくという方針で行い, 区間ごとの関数が異なってもかまわない.

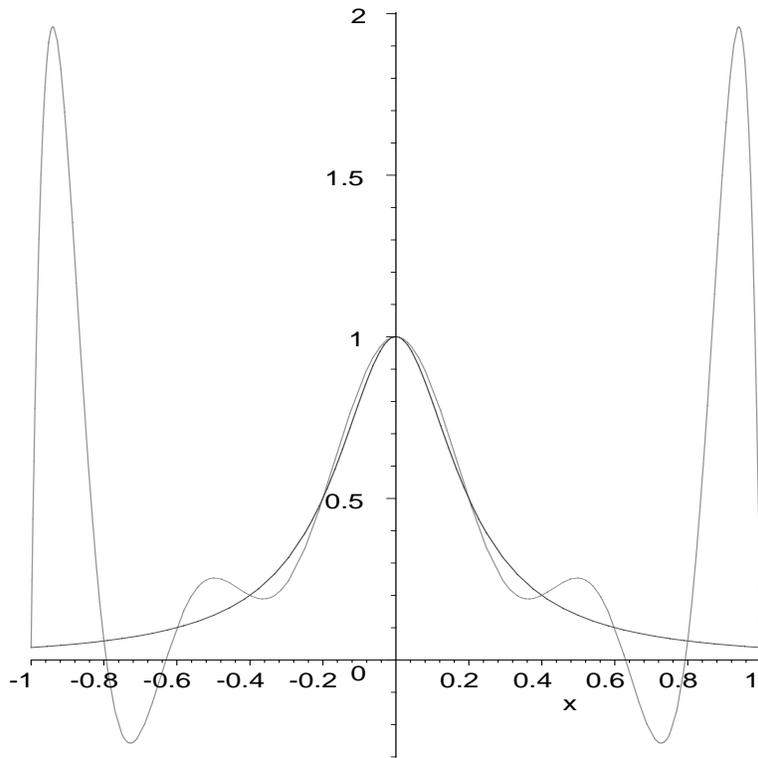
この方法はいろいろな所で応用されており, 身近なところではプリンターの縮小・拡大で用いられている.

Runge Phenomina

$f(x) = 1/(1 + 25x^2)$ とし, $g(x)$ を $x_0 = -1.0, x_1 = -0.8, \dots, x_{10} = 1.0$ と $[-1, 1]$ を 10 等分したデータが与えられたときの $f(x)$ の Lagrange 補完多項式とする. そのとき,

$$\begin{aligned}
g(x) = & 0.1022634893 \times (x + 0.8)(x + 0.6)(x + 0.4)(x + 0.2) \\
& \times (x - 0.2)(x - 0.4)(x - 0.6)(x - 0.8)(x - 1.0) \\
-1.587775228 & \times (x + 1)(x + 0.6)(x + 0.4)(x + 0.2)x \\
& \times (x - 0.2)(x - 0.4)(x - 0.6)(x - 0.8)(x - 1.0) \\
+12.11015005 & \times (x + 1.0)(x + 0.8)(x + 0.4)(x + 0.2)x \\
& \times (x - 0.2)(x - 0.4)(x - 0.6)(x - 0.8)(x - 1.0) \\
-64.58746694 & \times (x + 1.0)(x + 0.8)(x + 0.6)(x + 0.2)x \\
& \times (x - 0.2)(x - 0.4)(x - 0.6)(x - 0.8)(x - 1.0) \\
+282.5701678 & \times (x + 1.0)(x + 0.8)(x + 0.6)(x + 0.4)x \\
& \times (x - 0.2)(x - 0.4)(x - 0.6)(x - 0.8)(x - 1.0) \\
-678.1684028 & \times (x + 1.0)(x + 0.8)(x + 0.6)(x + 0.4)(x + 0.2) \\
& \times (x - 0.2)(x - 0.4)(x - 0.6)(x - 0.8)(x - 1.0) \\
+282.5701678 & \times (x + 1.0)(x + 0.8)(x + 0.6)(x + 0.4)(x + 0.2)x \\
& \times (x - 0.4)(x - 0.6)(x - 0.8)(x - 1.0) \\
-64.58746694 & \times (x + 1.0)(x + 0.8)(x + 0.6)(x + 0.4)(x + 0.2)x \\
& \times (x - 0.2)(x - 0.6)(x - 0.8)(x - 1.0) \\
+12.11015005 & \times (x + 1.0)(x + 0.8)(x + 0.6)(x + 0.4)(x + 0.2)x \\
& \times (x - 0.2)(x - 0.4)(x - 0.8)(x - 1.0) \\
-1.587775228 & \times (x + 1.0)(x + 0.8)(x + 0.6)(x + 0.4)(x + 0.2)x \\
& \times (x - 0.2)(x - 0.4)(x - 0.6)(x - 1.0) \\
+0.1022634893 & \times (x + 1.0)(x + 0.8)(x + 0.6)(x + 0.4)(x + 0.2)x \\
& \times (x - 0.2)(x - 0.4)(x - 0.6)(x - 0.8)
\end{aligned}$$

$f(x), g(x)$ を重ねて表示してみると,



となり, 2点 $x = -1, 1$ の周辺で $|f(x) - g(x)|$ のギャップがあることに気がつく.

7 数値積分法

7.1 この節の目標

初等関数と表せないとき定積分の計算は難しいことが知られている。この節では等間隔分割でもっとも基本的な台形公式, より精度が高いシンプソン公式, そして不定間隔分割のガウスの数値積分公式について解説する。

7.2 等間隔分点の数値積分法

7.2.1 区分求積法

$[a, b]$ 上の積分可能関数 $f(x)$ に対して

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{b-a}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i)$$

がリーマン積分の定義 (但し, 厳密ではないが)。よって, 十分大きい n に対して

$$\int_a^b f(x)dx := \frac{b-a}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i)$$

が成立する。このようにして積分値を近似的に求めることを区分求積法という。

($:=$ は近似の意味)

ここで $x_{i+1} = x_i + h$, $h = \frac{b-a}{n}$ と考える。

例 7.2.1.

$$S = \int_0^1 \frac{1}{1+x^2} dx.$$

$S_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{1+(j/n)^2}$ とおくと,

$$S_{10} = \frac{1}{10} \sum_{i=1}^{10} \frac{1}{1+(j/10)^2} = 0.7599814972 \\ := 0.759981$$

注意

理論値は $S = [\tan^{-1} x]_0^1 = \frac{\pi}{4} := 0.7853981634 := 0.785398$.

7.2.2 ニュートン・コーツの公式

区間 $[a, b]$ に対して, $x_0 = a$, $x_{i+1} = x_i + h$, $h = \frac{b-a}{n}$ としておく. 今データ $f(x_0) = f(a), f(x_1), \dots, f(x_n) = f(b)$ が与えられているとしてラグランジェの補間公式を考える. 即ち,

$$\sum_{j=0}^n L_j(x) f(x_j)$$

$$L_j(x) = \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{j-1})(x-x_{j+1})\cdots(x-x_n)}{(x_j-x_0)\cdots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\cdots(x_j-x_n)}$$

よって

$$\begin{aligned} \int_a^b \sum_{j=0}^n L_j(x) f(x_j) dx &= \sum_{j=0}^n \left(\int_a^b L_j(x) dx \right) f(x_j), \\ \int_a^b L_j(x) dx &= \int_0^n L_j(hu + x_0) h du \quad (u = \frac{x-x_0}{h}) \\ &= \int_0^n \frac{u(u-1)\cdots(u-j+1)(u-j-1)\cdots(u-n)}{(j-0)(j-1)\cdots 1(j-j-1)\cdots(j-n)} h du \\ &= h \frac{(-1)^{n-j}}{j!(n-j)!} \int_0^n u(u-1)\cdots(u-j+1)(u-j-1)\cdots(u-n) du \end{aligned}$$

$$A_j = \frac{(-1)^{n-j}}{j!(n-j)!} \int_0^n u(u-1)\cdots(u-j+1)(u-j-1)\cdots(u-n) du$$

とおくと,

$$\int_a^b \sum_{j=0}^n L_j(x) f(x_j) dx = \sum_{j=0}^n \left(\int_a^b L_j(x) dx \right) f(x_j) = h \sum_{j=0}^n A_j f(x_j)$$

故に, $\int_a^b f(x) dx$ の近似値として $h \sum_{j=0}^n A_j f(x_j)$ が採用できる. これをニュートン・コーツの積分公式という.

ニュートン・コーツの公式の $n = 1, 2$ の場合を考えてみる.

Case(1). $n = 1$ (台形公式)

$$\int_a^b f(x) dx := \frac{h}{2} \{f(a) + f(b)\}.$$

$$\begin{cases} A_0 = (-1) \int_0^1 (u-1) du = \frac{1}{2} \\ A_1 = (-1)^2 \int_0^1 u du = \frac{1}{2} \end{cases}$$

Case(2). $n = 2$ (シンプソン公式)

$$\int_a^b f(x) dx := h \{A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2)\}$$

$$\begin{cases} A_0 = \frac{1}{2} \int_0^2 (u-1)(u-2) du = \frac{1}{3} \\ A_1 = - \int_0^2 u(u-2) du = \frac{4}{3} \\ A_2 = \frac{1}{2} \int_0^2 u(u-1) du = \frac{1}{3} \end{cases}$$

よって

$$\int_a^b f(x)dx := \frac{h}{3}(f(a) + 4f(x_1) + f(b)).$$

実際の計算では, 等分した各区間で台形公式, あるいは, シンプソンを実行する.

定理 7.2.2. f を区間 $[a, b]$ 上の積分可能な関数とする.

- (1) $[a, b]$ を n 等分し, その分点を x_1, x_2, \dots, x_n とする. $h = \frac{b-a}{n}$ とおく. このとき台形公式 (複合)

$$h \left\{ \frac{f(a)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + \frac{f(b)}{2} \right\}$$

を得る.

- (2) $[a, b]$ を $2m$ 等分してその分点を x_1, x_2, \dots, x_{2m} とする. このときシンプソン公式

$$\frac{h}{3} \left\{ f(a) + 4 \sum_{i=1}^m f(x_{2i-1}) + 2 \sum_{i=1}^{m-1} f(x_{2i}) + f(b) \right\}$$

を得る.

7.2.3 誤差

台形公式, シンプソン公式における誤差について述べる.

定理 7.2.3. f を $[a, b]$ 上の C^2 -級関数, $h = \frac{b-a}{n}$ とおく. さらに $M = \max_{a \leq x \leq b} \{|f''(x)|\}$. このとき

$$E = \int_a^b f(x)dx - h \left\{ \frac{f(a)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + \frac{f(b)}{2} \right\}$$

とおくと

$$|E| \leq \frac{(b-a)^3}{12n^2} M.$$

定理 7.2.4. f を $[a, b]$ 上の C^4 -級関数, $h = \frac{b-a}{2m}$ とおく. さらに $M = \max_{a \leq x \leq b} \{|f''(x)|\}$. このとき

$$E = \int_a^b f(x)dx - \frac{h}{3} \left\{ f(a) + 4 \sum_{i=1}^m f(x_{2i-1}) + 2 \sum_{i=1}^m f(x_{2i}) + f(b) \right\}$$

とおくと

$$|E| \leq \frac{(b-a)^5}{2880m^4} M.$$

例 7.2.5. $\int_0^2 \frac{1}{1+x} dx$ のとき, $n = 10$ に対して

- (1) 台形公式の場合: $M = \max\left\{\frac{2}{(1+x)^3}\right\} = 2$. よって $|E| \leq \frac{1}{600} := 0.01333 \dots$ となり小数点以下 1 桁まで正確に求められる.
- (2) シンプソン公式の場合: $M = \max\left\{\frac{2}{(1+x)^3}\right\} = 2$. よって $|E| \leq \frac{2^6}{2880 \times 5^4} = 0.00003555 \dots$ となり, 小数点以下 4 桁まで正確に求められる.

例 7.2.6. $I = \int_0^1 \sqrt{2+x^2} dx$ を $n = 4$ の場合のシンプソン公式で求めてみると,

$$\begin{aligned} I &= \frac{0.25}{3} \{f(0) + 4(f(\frac{1}{4}) + f(\frac{3}{4})) + 2f(\frac{1}{2}) + f(1)\} \\ &= 1.524495938 \end{aligned}$$

となる. ♠

7.3 不等間隔の数値積分法 (ガウスの数値積分)

n を固定したとき

$$\int_a^b f(x) dx := \sum_{i=1}^n a_i f(x_i)$$

で近似するもので最もいいもの考える (x_1, x_2, \dots, x_n) は等間隔にとれているとは限らない). しかも異なる x_1, x_2, \dots, x_n , n 個の係数 a_1, a_2, \dots, a_n を任意の m 次多項式 $p(x)$ について

$$\int_a^b p(x) dx = \sum_{i=1}^n a_i p(x_i)$$

となるように決定する. このとき, m をなるべく大きく取ろうと考える.

注意 適当な変換によって, $a = -1, b = 1$ に考察すればよい.

定理 7.3.1 (定理 (ガウスの積分公式)). 任意の n に対してある $x_1, x_2, \dots, x_n, a_1, a_2, \dots, a_n$ が存在して

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &:= \sum_{i=1}^n a_i f(x_i) \times \frac{b-a}{2} \\ \int_a^b q(x) dx &= \sum_{i=1}^n a_i q(x_i) \end{aligned}$$

但し, q は $2n - 1$ 次多項式, $x_{0,1}, x_{0,2}, \dots, x_{0,n}$ はルジャンドルの多項式 $P_n(x)$ の $[-1, 1]$ における零点.

$$\begin{aligned} x_i &= \frac{b-a}{2} x_{0,i} + \frac{b+a}{2} \\ a_i &= \int_{-1}^1 \frac{P_n(x)}{(x-x_{0,i})P'_n(x)} dx \quad (1 \leq i \leq n) \end{aligned}$$

注意 11. $x_{0,i}$, a_i は, f に依存しないで決定される. (下表参照)

分点数 (n)	分点 ($x_{0,i}$)	重み (a_i)
2	± 0.5773502691	1.0
3	± 0.7745966692	0.5555555555
	0	0.8888888888
4	± 0.8611363115	0.3478548451
	± 0.3399810435	0.6521451548
5	± 0.9061798459	0.2369268850
	± 0.5384693101	0.4786286704
	0	0.5688888888

ここで $P_n(x)$ がルジャンドル多項式とは, $n = 0, 1, 2, \dots$ に対して

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \cdot \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \quad (\text{ロドリゲの公式})$$

で定義される. 実は, $P_n(x)$ は

$$(1 - x^2)y'' - 2xy' + n(n+1)y = 0$$

の微分方程式の解である. 基本的性質として

(1) $P_n(x) = 0$ の解は $[-1, 1]$ 内に存在する.

(2)

$$\int_{-1}^1 P_n(x)P_m(x)dx = \delta_{n,m} \frac{2}{2n+1}.$$

但し,

$$\delta_{n,m} = \begin{cases} 1 & \text{もし } n = m \\ 0 & \text{もし } n \neq m \end{cases}$$

注意 12. $\{\sqrt{\frac{2n+1}{2}}P_n(x)\}_{n=1}^{\infty} = \{e_n(x)\}_{n=1}^{\infty}$ は, ヒルベルト空間 $L^2(0, 1)$ の正規直交基底となる. つまり $C[0, 1]$ 上に

$$(f|g) = \int_0^1 f(x)g(x), \quad f, g \in C[0, 1]$$

と内積を定義し, $\|f\|_2 = \sqrt{(f|f)}$ とノルムをおくと $L^2(0, 1)$ は $C[0, 1]$ の $\|\cdot\|_2$ による完備空間であり, 任意の $f \in L^2(0, 1)$ にたいして

$$f = \sum_{i=1}^{\infty} (f|e_i)e_i$$

と分解できる.

8 微分方程式

8.1 この節の目標

簡単な常微分方程式の数値解法であるオイラー法, ホイン法などのルンゲ・クッタ型公式について説明する.

8.2 理論的解説

一階の線形微分方程式

$$y' + p(x)y = q(x)$$

の解法を思い出そう.

まず, $y' + p(x)y = 0$ の場合 (斉次の場合) を考える.

$$\begin{aligned} y' &= -p(x)y \\ \frac{y'}{y} &= -p(x) \\ \int \frac{1}{y} dy &= -\int p(x) dx \\ \log |y| &= -\int p(x) dx + C \\ y &= \pm e^C e^{-\int p(x) dx}. \end{aligned}$$

次に, 求める解 y に対して

$$y(x) = u(x)e^{-\int p(x) dx} = u(x)y_0(x)$$

とおく (ラグランジェの定数変化法). よって与式は,

$$\begin{aligned} u'y_0 + uy_0' + p(x)u(x)y_0(x) &= q(x) \\ u'y_0 + u(y_0' + py_0) &= q. \end{aligned}$$

ところで, $y_0' + py_0 = 0$ より

$$\begin{aligned} u' &= \frac{1}{y_0}q \\ u &= \int \frac{1}{y_0}q dx + C \end{aligned}$$

故に求める解 y は

$$y = uy_0 = e^{-\int p dx} \left(\int \frac{1}{y_0} q dx + C \right).$$

注意 13. 一般の n 解の微分方程式の場合は, 適当な変形をして

$$\frac{dY}{dx} = f(x, Y) \quad (Y \in \mathbf{R}^n)$$

$$Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

$$f(x, Y) = \begin{pmatrix} f_1(x, y_1, \dots, y_n) \\ f_2(x, y_1, \dots, y_n) \\ \vdots \\ f_n(x, y_1, \dots, y_n) \end{pmatrix}$$

と置き換えができ, 一階の場合と同様にできる.

例 8.2.1.

$$y'' - (1 - y^2)y' + y = 0$$

の方程式は, $y' = z$ とおくと

$$\frac{d}{dx} \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z \\ (1 - y^2)z - y \end{pmatrix}$$

8.3 ルンゲ・クッタ型公式

$\frac{dy}{dx} = f(x, y)$, $y(x_0) = y_0$ の微分方程式の $x = b$ ($x_0 < b$) の解の値 $y(b)$ を数値解析的に求める.

理論的には f が十分滑らかならば (もっと具体的に, f が $[a, b]$ ($a \leq x_0$) でリップシッツ条件を満たせば), 条件を満たす $y(x)$ が存在すること知られている.

$h > 0$ に対して $y(x_0 + h) = y(x_1)$ の値を求めよう.

$$y(x_1) = y(x_0 + h) = y_0 + h\Phi(x_0, y(x_0); h)$$

とおくことができる. $[x_0, b]$ を刻み幅 h で分解して, 上の操作をくり返して値を求めようとする.

$$x_{k+1} = x_k + h$$

$$y(x_k) = y(x_{k-1}) + h\Phi(x_{k-1}, y(x_{k-1}); h) \quad (1 \leq k \leq n)$$

$(x_n = b)$ の漸化式が定まる. これをルンゲ・クッタ公式という. 一般に Φ は複雑な関数. この Φ を適当な計算しやすい関数 F でおきかえて近似値を求めることをする.

8.4 オイラー法

テイラー展開より

$$\begin{aligned}
y(x+h) &= y(x) + \sum_{n=1}^k \frac{1}{n!} h^n y^{(n)}(x) + \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} y^{(k+1)}(x+\theta h) \quad (0 < \theta < 1) \\
&= y(x) + hf(x, y(x)) + \frac{h}{2!} \frac{d}{dx} f(x, y(x)) + \cdots + \frac{h^k}{k!} \frac{d^{k-1}}{dx^{k-1}} f(x, y(x)) \\
&\quad + \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} \frac{d^k}{dx^k} f(x+\theta, y(x+\theta h)) \\
\Phi(x, y(x); h) &= \frac{y(x+h)-y(x)}{h} \\
&= f(x, y(x)) + \frac{1}{2!} \frac{d}{dx} f(x, y(x)) + \cdots + \frac{h^{(k-1)}}{k!} \frac{d^{k-1}}{dx^{k-1}} f(x, y(x)) \\
&\quad + \frac{h^k}{(k+1)!} \frac{d^k}{dx^k} f(x+\theta, y(x+\theta h))
\end{aligned}$$

そこで Φ を

$$F(x, y(x); h) = f(x, y(x)) + \frac{1}{2!} \frac{d}{dx} f(x, y(x)) + \cdots + \frac{h^{(k-1)}}{k!} \frac{d^{k-1}}{dx^{k-1}} f(x, y(x))$$

とおきかえる。このとき、

$$|F(x, y(x); h) - \Phi(x, y(x); h)| = \left| \frac{h^k}{(k+1)!} \frac{d^k}{dx^k} f(x+\theta, y(x+\theta h)) \right| = O(h^k)$$

ここで $O(h^k)$ の意味は、ある定数 $M > 0$ で $\frac{1}{|h^k|} |F(x, y(x); h) - \Phi(x, y(x); h)| \leq M$ が成立するものがあることをいう。 $(\frac{1}{h^k} \{F(x, y(x); h) - \Phi(x, y(x); h)\})$ が有界ともいう

注意 14. (1) 一般に 2 つの関数 ϕ, ψ の間で、 $\phi(h) = O(\psi(h))$ は $\frac{\phi(h)}{\psi(h)}$ が有界であることをいう。

(2) 上の操作のように微分係数を近似することを差分近似といい、 $\frac{f(x+h)-f(x)}{h}$ 等を差分商という。そのような差分を含む方程式を差分方程式という。

(3) $F(x, y(x); h) - \Phi(x, y(x); h) = O(h^{p+1})$ のとき、 $F(x, y(x); h)$ から導かれるアルゴリズムは精度 p をもつという。

 $k = 1$ のとき

$$F(x, y(x); h) = f(x, y(x))$$

であり、求める漸化式は

アルゴリズム 8.4.1.

$$y_k = y_{k-1} + hf(x_{k-1}, y_{k-1}) \quad (1 \leq k \leq n)$$

となる。これをオイラー法 (1 次のルンゲ・クッタ公式) という。

注意 オイラー法は精度 1 のアルゴリズム。

8.5 ホイン法 (2 次のルンゲ・クッタ公式)

$F(x, y; h) = \frac{1}{2}\{f(x, y) + f(x + h, y + hf(x, y))\}$ とおいたとき得られる漸化式

アルゴリズム 8.5.1.

$$y_k = y_{k-1} + \frac{h}{2}\{f(x_{k-1}, y_{k-1}) + f(x_{k-1} + h, y_{k-1} + hf(x_{k-1}, y_{k-1}))\}$$

をホイン法という.

実際, テイラー展開などより ($\frac{dy}{dx} = f(x, y)$, $y(x_0) = y_0$ に注意)

$$\begin{aligned} y(x_{k-1} + h) &= y(x_{k-1}) + hy'(x_{k-1}) + \frac{h^2}{2}y''(x_{k-1}) + O(h^3) \\ y''(x) &= f(x, y)' = \frac{df(x, y(x))}{dx} \\ &= \frac{\partial f(x, y(x))}{\partial x} + \frac{\partial f(x, y(x))}{\partial y}y' \\ f(x + h, y + h\tau) &= f(x, y) + h\frac{\partial f(x, y(x))}{\partial x} + \tau h\frac{\partial f(x, y(x))}{\partial y} + O(h^2) \end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned} f(x_{k-1} + h, y(x_{k-1}) + hf(x_{k-1}, y(x_{k-1}))) &= f(x_{k-1}, y(x_{k-1})) + h\frac{\partial f(x_{k-1}, y(x_{k-1}))}{\partial x} \\ &\quad + hf(x_{k-1}, y(x_{k-1}))\frac{\partial f(x_{k-1}, y(x_{k-1}))}{\partial y} + O(h^2) \\ &= f(x_{k-1}, y(x_{k-1})) + hy''(x_{k-1}) + O(h^2). \end{aligned}$$

従って,

$$hy''(x_{k-1}) = f(x_{k-1} + h, y(x_{k-1}) + hf(x_{k-1}, y(x_{k-1}))) - f(x_{k-1}, y(x_{k-1})) - O(h^2).$$

これから

$$\begin{aligned} y(x_k) &= y(x_{k-1} + h) \\ &= y(x_{k-1}) + hf(x_{k-1}, y(x_{k-1})) + \frac{h}{2}hy''(x_{k-1}) + O(h^3) \\ &= y(x_{k-1}) + hf(x_{k-1}, y(x_{k-1})) \\ &\quad + \frac{h}{2}\{f(x_{k-1} + h, y(x_{k-1}) + hf(x_{k-1}, y(x_{k-1}))) - f(x_{k-1}, y(x_{k-1})) - O(h^2)\} + O(h^3) \\ &= y(x_{k-1}) + \frac{h}{2}\{f(x_{k-1}, y(x_{k-1})) + f(x_{k-1} + h, y(x_{k-1}) + hf(x_{k-1}, y(x_{k-1})))\} \\ &\quad + O(h^3) - \frac{h}{2}O(h^2) \\ &= y(x_{k-1}) + \frac{h}{2}\{f(x_{k-1}, y(x_{k-1})) + f(x_{k-1} + h, y(x_{k-1}) + hf(x_{k-1}, y(x_{k-1})))\} + O(h^3) \end{aligned}$$

注意 ホイン法は精度 2 のアルゴリズム.

8.6 ルンゲ・クッタ公式 (4 次)

普通ルンゲ・クッタ公式とは 4 次のことを意味する. オイラー法, ホイン法と同様に導き方はあるがここでは省略し, アルゴリズムのみを紹介する:

アルゴリズム 8.6.1.

$$\left\{ \begin{array}{l} y_0 = y(x_0) \\ l_1 = hf(x_{k-1}, y_{k-1}) \\ l_2 = hf(x_{k-1} + \frac{h}{2}, y_{k-1} + \frac{l_1}{2}) \\ l_3 = hf(x_{k-1} + \frac{h}{2}, y_{k-1} + \frac{l_2}{2}) \\ l_4 = hf(x_{k-1} + h, y_{k-1} + l_3), \\ y_k = y_{k-1} + \frac{1}{6}(l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4) \\ x_k = x_{k-1} + h \end{array} \right.$$

注意 ルンゲ・クッタ公式は精度4のアルゴリズムである.

例 8.6.2. $\frac{dy}{dx} = \frac{y}{2x}$, $y(1) = 1$ の方程式の解 y の $y(2)$ の近似値を求めよう.
 $h = 0.1$ とすれば, $y(2)$ の近似値は y_{10} となる.

オイラー法

$$y_k = y_{k-1} + h \frac{y_{k-1}}{2x_{k-1}} \\ (1 \leq k \leq 10).$$

ホイン法

$$y_k = y_{k-1} + \frac{h}{2} \left\{ \frac{y_{k-1}}{2x_{k-1}} + \frac{y_{k-1} + h \frac{y_{k-1}}{2x_{k-1}}}{2(x_{k-1} + h)} \right\} \\ (1 \leq k \leq 10)$$

ルンゲ・クッタ法

アルゴリズム 8.6.1 を参考にして各自作ってみよ.

k	オイラー法	ホイン法	ルンゲ・クッタ
1	1.05	1.048863636	1.048809
2	1.097727273	1.095546014	1.095546014
3	1.143465909	1.140315923	1.140175
4	1.187445367	1.183391044	1.183216
5	1.22985413	1.22495061	1.224745
6	1.270849268	1.265144302	1.264911
7	1.310563307	1.304098654	1.303841
8	1.349109287	1.341921776	1.341641
9	1.386584545	1.378706913	1.378405
10	1.423073612	1.414535152	1.414214

理論値は、 $y(x) = \sqrt{x}$ であるから、 $y(2) = \sqrt{2}$ となる。ルンゲ・クッタ公式で求める方が精度が高いことがわかる。しかしながら、 $\sqrt{2}$ の近似値を求めるだけならニュートン法の方がよらしい(第3節参照)。

8.7 幾何的意味

オイラー法とホイン法は”絵を描く”と理解できる。

オイラー法は、 y_1, \dots, y_{n-1} と求めていった後 y_n を次のように求めている。まず点 (x_{n-1}, y_{n-1}) における $y(x)$ の接線の傾きを求めると $y'(x_{n-1}) = f(x_{n-1}, y_{n-1})$ 。この傾きをもち点 (x_{n-1}, y_{n-1}) を通る直線の方程式は

$$g(x) = f(x_{n-1}, y_{n-1})(x - x_{n-1}) + y_{n-1}$$

このとき $y_n = g(x_n)$ 。

ホイン法はこの方法を少し修正している。オイラー法と同じように y_1, \dots, y_{n-1} と求めていった後 k_n を次のようにおく。

$$k_n = f(x_{n-1}, y_{n-1})h + y_{n-1}.$$

次に、点 $x = x_n$ 上の $y(x)$ の接線の傾き $f(x_n, y(x_n))$ を $f(x_n, k_n)$ と考え、点 (x_{n-1}, y_{n-1}) を通る傾き $f(x_n, k_n)$ の直線 $g(x)$ を考える。

$$g(x) = f(x_n, k_n)(x - x_{n-1}) + y_{n-1}$$

$l_n = g(x_n)$ とおくと、求める $y_n = \frac{1}{2}(k_n + l_n)$ 。

9 練習問題

9.1 第2節

問題 9.1.1. (1) 負の数を表すための 2 の補数による表示を用いるとき, 1 バイト (8 ビット) で表現できる整数の範囲を求めよ.

(2) $(01110101)_2$ に対する 2 の補数を求めよ.

(3) $(1.0625)_{10}$ を 2 進数表示に変換せよ.

(4) $(100)_{16}$ を 8 進数に変換せよ.

(5) 次の 16 進数の加算をせよ (結果も 16 進数表示).

$$469_{16} + 2AE_{16}$$

問題 9.1.2. 次の 2 進数表示を 10 進数表示へ変えよ.

(1) $(100101)_2$

(2) $(10000001)_2$

(3) $(0.1100011)_2$

(4) $(0.11111111)_2$

問題 9.1.3. 次の 10 進数表示を 2 進数表示へ変えよ.

(1) 109

(2) 3433

(3) 1.0625

問題 9.1.4. (1) $x := 3.32$, $y := 5.37$ のとき, $x + y$, xy の範囲を求めよ. 但し, $x := 0.a_1a_2 \cdots a_n$ は, 小数点第 $n + 1$ 位を四捨五入して丸めた数を意味する.

(2) $y_{-1} = 0$ とし, $k = 0, 1, \dots, n$ に対し,

$$y_k = 1 + \frac{k}{n - k + 1}xy_{k-1}$$

によって計算するとき, y_n を x で表せ.

9.2 第4節

問題 9.2.1. $x^5 - 5 = 0$ の正の実数解をニュートン近似法で求めよ. 但し, 許容誤差 10^{-4} とする.

注意: 計算過程を書くこと.

(方針: 近似値として小数点以下第5位以上を切り捨てる)

問題 9.2.2. 3次方程式 $x^3 + 2x^2 + 10x - 20 = 0$ について次の設問に答えよ.

- (1) 解はいくつ存在するか示せ.
- (2) ニュートン法を用いて解を求めよ. 但し, 許容絶対誤差を 10^{-8} とする.

問題 9.2.3. 方程式

$$m = x - E \sin x$$

を $m = 0.8, E = 0.2$ のとき次の設問に答えなさい.

- (1) 解は0と1の間にあることを示せ.
- (2) $g(x) = m + E \sin x$ とおくと, g は縮小写像であり, かつ,

$$|g(x) - g(y)| \leq 0.2|x - y| \quad (x, y \in [0, 1])$$

が成立することを示せ.

- (3) $g(x)$ は縮小写像より上の方程式の解は存在するが (縮小写像の原理), それを α とおいたとき, 反復

$$x_{n+1} = g(x_n) \quad (x_0 = 0)$$

に対して, x_{10} と α との絶対誤差の限界を求めよ. つまり,

$$\frac{|x_{10} - \alpha|}{|\alpha|} \leq L$$

となる L の最小値を求めよ.

9.3 第5節

問題 9.3.1. (1) 定理 5.2.1 の証明せよ.

(2) 行列 $A = [a_{i,j}]$ が定理 5.4.1 を満たしているとき, A にガウスの消去法を一回施した行列を

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & c \\ 0 & B \end{pmatrix}$$

とおく. ここで, c は $1 \times (n-1)$ 行列, B は $(n-1) \times (n-1)$ 行列. このとき B も定理の仮定を満たすことを示せ. すなわち $B = [b_{i,j}]$ と表現したとき

$$|b_{k,k}| > \sum_{j=1, j \neq k} |b_{k,j}|$$

($k = 1, 2, \dots, n-1$).

注意 上のことより, A が定理 5.4.1. の仮定を満たすときは, LU 分解ができる. (何故か)

問題 9.3.2. 2 曲線 $x^2 + y^2 = 2$, $x^2 - y^2 = 1$ の交点を, $x_0 = y_0 = 1$ から始めてニュートン法で解け. 但し, 許容絶対誤差を 10^{-6} とする.

問題 9.3.3. 次の方程式をガウス・ザイデル法で解け. 但し, 許容誤差は 10^{-4} である.

$$\begin{pmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 1 & 4 & 1 \\ 0 & 1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

問題 9.3.4.

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 4 \end{pmatrix}$$

- (1) A の LU 分解を求めよ.
- (2) (1) の LU 分解を用いて

$$A \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ -1 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix}$$

を解け. 但し, 少数点以下 2 桁で近似値を求めよ.

9.4 第6節

問題 9.4.1. 次のデータが与えられているとする:

x_k	0.00	0.50	1.50	2.00
$f(x_k)$	1.00	1.65	4.48	7.39

このとき, 最小 2 乗 2 次多項式 $g(x)$ を求めよ. また, $g(1.0)$ を求めよ.

問題 9.4.2. 指数関数 $\exp(x)$ の数表の一部が有効数字 5 桁で以下のように与えられている:

x_k	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4
$\exp(x_k)$	1.0000	1.1052	1.2214	1.3499	1.4918

- (1) $x_0 = 0.0, x_1 = 0.1, x_2 = 0.4$ の値を用いて $g(x) = a_2x^2 + a_1x + a_0$ を次のアルゴリズムを用いて求めよ.
 $n = 0, 1, 2 \dots$ にたいして

$$\begin{aligned}\omega_n(x) &= \prod_{i=0}^n (x - x_i) \\ p_n(x) &= p_{n-1}(x) + b_n \omega_n(x) \\ b_n &= \frac{\exp(x_n) - p_{n-1}(x_n)}{\omega_n(x_n)}\end{aligned}$$

$g(x) = p_2(x)$ として求める.

- (2) 上の x_0, x_1, x_2 を用いて最小 2 乗 2 次多項式 $h(x)$ を求めよ.
 (3) $g(0.2)$ の値, $h(0.2)$ の値それぞれと $\exp(0.2)$ の絶対誤差を求めよ.

注意 15. 上の (1) のアルゴリズムで x_0, x_1, \dots, x_n の n 次補間多項式を求めることができるが (何故か?), この方法をニュートン補間という.

9.5 第7節

問題 9.5.1.

$$S = \int_0^1 \frac{1}{(1+x)^2} dx$$

に対して次の設問に答えよ.

- (1) 理論値を求めよ.
- (2) $n = 2$ に対して, シンプソン公式での近似値を求めよ.
- (3) $n = 3$ に対しての, ガウスの積分公式での近似値を求めよ.

問題 9.5.2.

$$S = \int_0^1 x\sqrt{1+x^2} dx$$

に対して次の設問に答えよ.

- (1) 理論値を求めよ.
- (2) $n = 10$ に対して, 台形公式での近似値を求めよ.
- (3) $n = 10$ に対しての, シンプソン公式での近似値を求めよ.

但し, 小数点以下 5 桁を有効とする.

問題 9.5.3. (プログラムを書いて実行しよう)

楕円 $\frac{x^2}{2} + y^2 = 1$ の周の長さ L を複合台形公式を用いて求めよう. ここで, 曲線 C が $x = g(t)$, $y = h(t)$ ($a \leq t \leq b$) でパラメータで表示されているとき, t が a から b まで変化するときの C の長さ L は

$$L = \int_a^b \sqrt{g'(t)^2 + h'(t)^2} dt$$

で表示できる. これを利用して, 分割数 100 で近似値を求めよ.

9.6 第8節

問題 9.6.1.

$$\begin{cases} y' = y \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

の線形微分方程式について次の設問に答えよ.

- (1) オイラー法で求める際の $y(x_n)$ に関する漸化式を求めよ.
但し, $x_0 = 0$, $x_n = x_{n-1} + h$ ($n = 1, 2, \dots$), きざみ幅を h とする.
- (2) $h = 0.2$ として, $y(1)$ を求めよ.
- (3) $\lim_{n \rightarrow \infty} y(x_n)$ を求めよ.

問題 9.6.2. $y' = y - x$, $y(0) = 0$ なる微分方程式を考えよ.

- (1) 真の解 $y(x)$ を理論的に求めよ.
- (2) きざみ幅 $h = 2^{-3}$ の場合, $x = 1$ における値をオイラー法で求めよ.
- (3) きざみ幅 $h = 2^{-3}$ の場合, $x = 1$ における値をホイン法で求めよ.