計算情報学Ⅰ

名古屋大学　情報文化学部
自然情報学科３年
第８回

鈴木泰博
情報文化学部・大学院情報科学研究科
複雑系科学専攻

Science of
interactions

Agenda
計算情報学Ｉ 第８回

1. 前回の復習
2. エイトケンの加速法
3. ステファンセンの方法

4. 線形補間
5. ２次補間
6. ラグランジュ補間
7. スプライン補間

Science of interactions

逐次代入法
最も原始的な近似解法

$f(x)$を$x = g(x)$と変形した方程式を、$x_{k+1} = g(x_k)$ と逐次に代入することにより解く方法

$x = \cos x$

$x_1 = 1$ (rad)

$x_2 = \cos x_1 = \cos 1$

$\vdots$

$x_{k+1} = \cos x_k$

なにしろ簡単なので昔から広く使われてきた。でも、収束が遅い。

演習：逐次代入法をプログラミングしこの問題をといてみよ。

Science of interactions

逐次代入法の原理

区間の縮小の程度を決める
だから解近傍での$g'(\tau)$が小さいほど収束が早くなる。

ここがポイント

$|e_{i+1}| = |g'(\tau_i)| \cdot |e_i| \leqq K|e_i|$, $(i = 0, 1, \ldots)$

より、

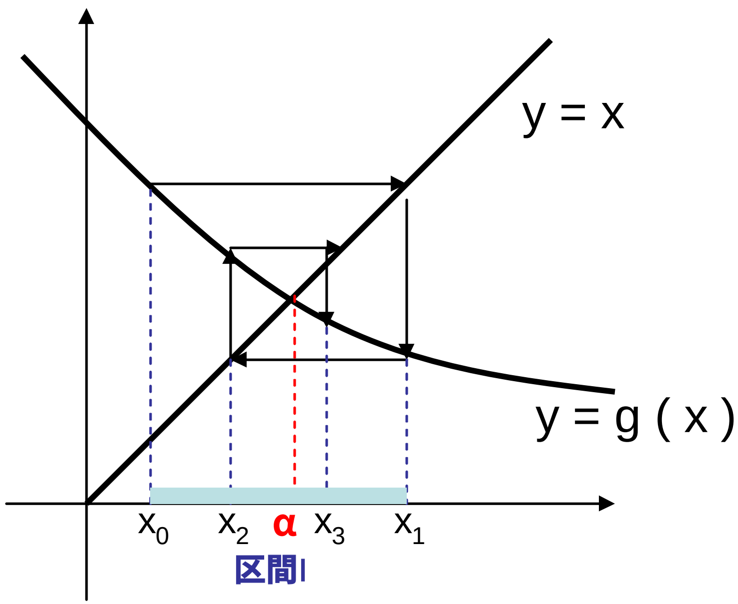
$|e_{i+1}| \leqq K|e_i| \leqq K^2|e_{i-1}| \leqq \ldots \leqq K^{i+1}|e_0|$

$K<1$より、

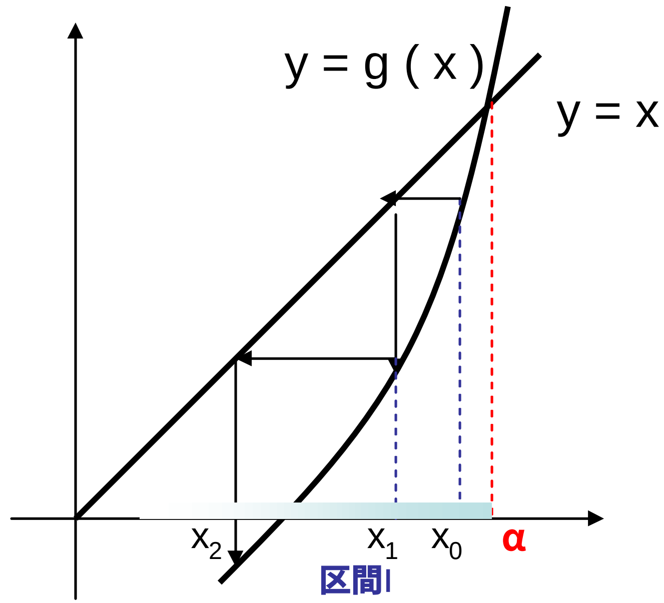
$\lim k_{i+1} = 0\ (i \to \infty)$, $\lim |e_{i+1}| = 0\ (i \to \infty)$

$\Rightarrow \lim x_i = \alpha\ (i \to \infty)$。

評価のために定数Kで変数$g'(\tau_i)$を上から押さえる

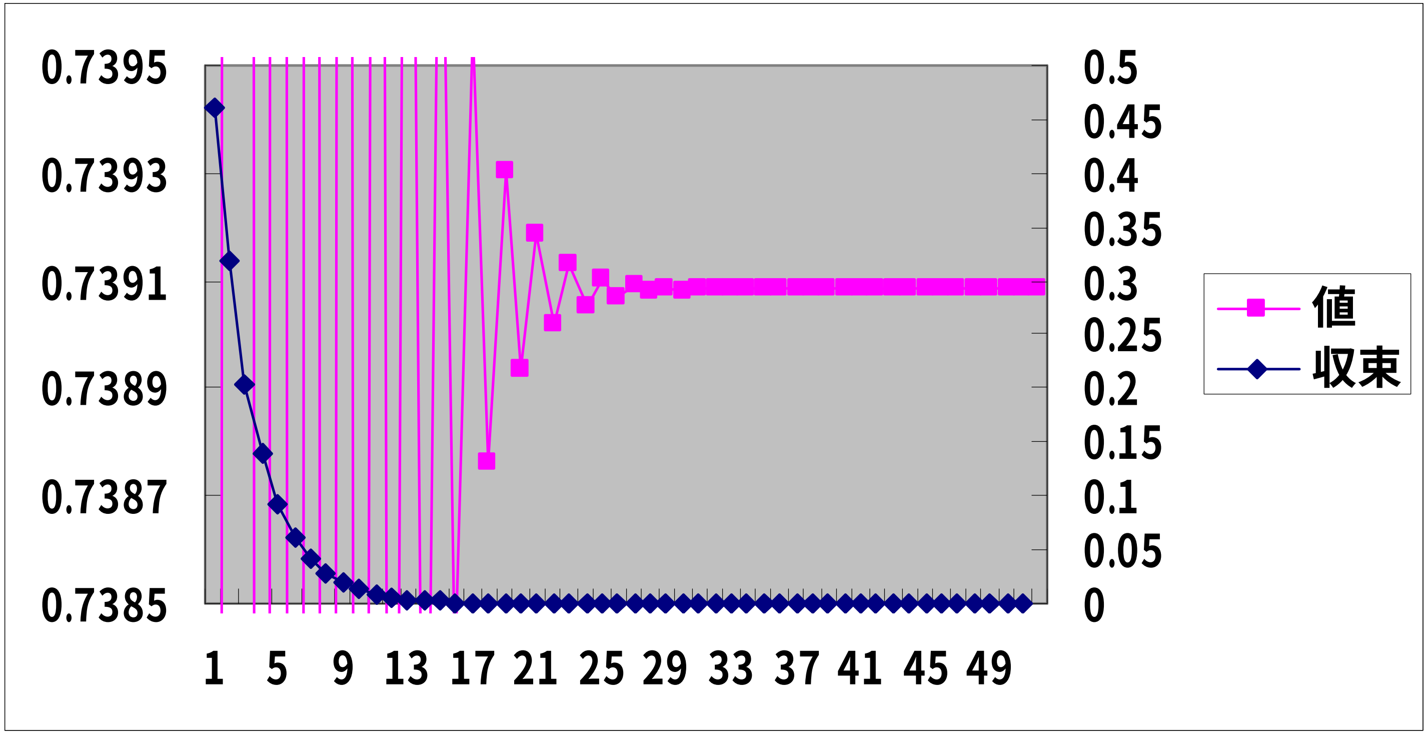


収束する場合 $K = |g'(x)| < 1$



発散する場合 $K = |g'(x)| > 1$

逐次代入法
数値実験の結果



解の周辺に達するまでに約２５回かかった。
そこから、収束するまでも約２５回の反復計算が必要であった
(トータル　５１回の反復計算で正解に到達) 。

収束の速さの評価

反復式 $x_{k+1} = \phi(x_k)$ **①の解（真の値）を$x_{真}$とする。**
また、第k近似解x_kの誤差を$e_k = x_k - x_{真}$
つまり、$x_k = x_{真} + e_k$**とする。**
①より、$x_{k+1} = \phi(x_{真} + e_k)$**。これをテイラー展開すると、**

$$x_{k+1} = \Phi(x_{真}) + \Phi'(x_{真})e_k + \frac{\Phi''(x_{真})}{2}e_k^{\ 2}$$

$\phi(x_{真}) = x_{真}$**、かつ、**$x_{k+1} = x_{真} + e_{k+1}$**より、**

誤差の評価

$$e_{k+1} = \Phi'(x_{真})e_k + O(e_k^2)$$
$$\cong Ce_k$$

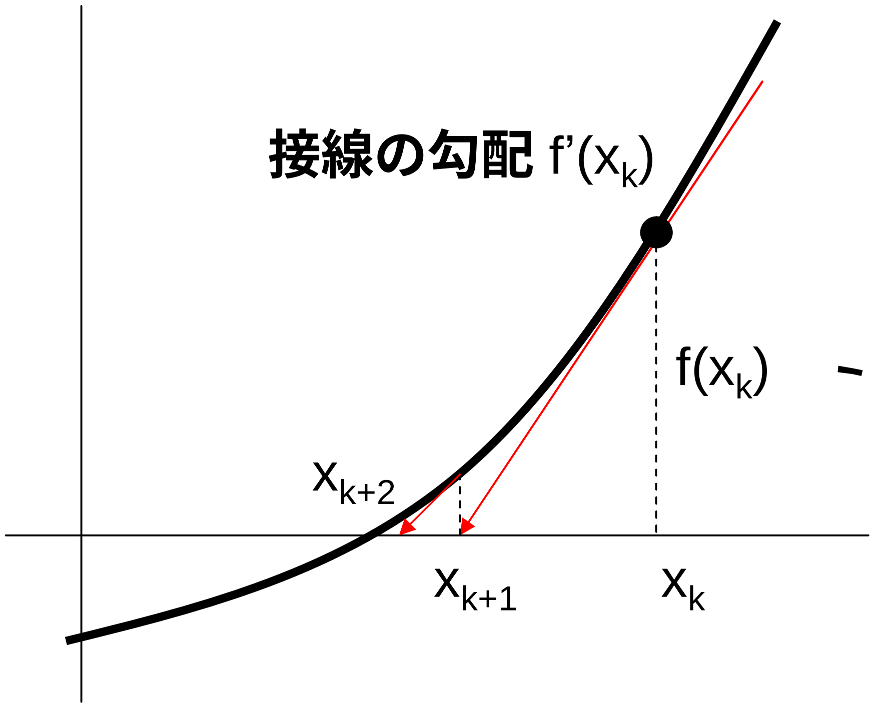
「1次収束」、もしくは、「収束次数が1」である

$|f(x_{真})|$**が**
>1 … **発散**
<1 … **収束**
この値に収束の速度が依存

Science of interactions

ニュートン法

- きわめてシンプルだが、収束が早く実用的
- 他のより複雑な手法と比べてもさほど遜色がない
- 唯一の難点はf’’(x)の計算が必要なこと



初期値を適当に選ぶ

k = 0,1,2,...,の順に

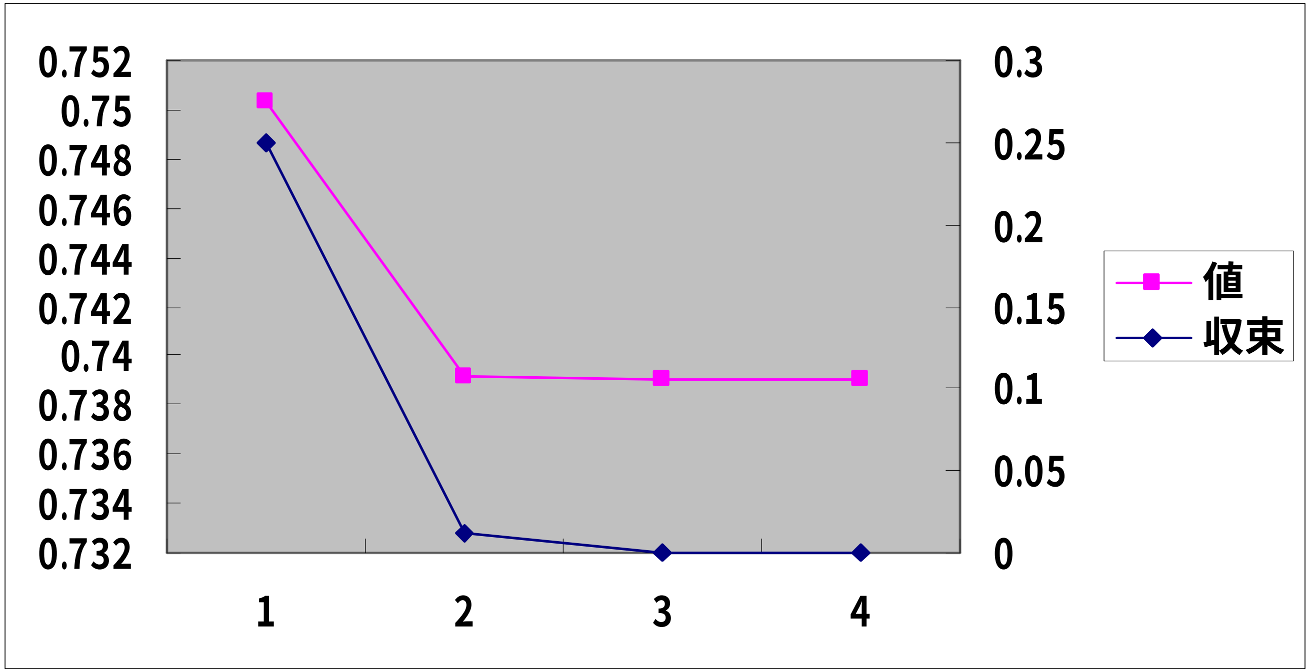
$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

収束判定

$$f'(x_k) = \frac{f(x_k)}{x_k - x_{k+1}}$$ より。

Science of interactions

ニュートン法
数値実験の結果



逐次法では51回の反復計算が必要であったが、4回の反復で正解に到達した。
1回の反復で既に解の近傍に到達し、すぐに収束している。

収束の速さの評価

反復式　$x_{k+1} = \phi(x_k)$　①の解（真の値）を$x_{真}$とする。
また、第k近似解x_kの誤差を$e_k = x_k - x_{真}$
つまり、$x_k = x_{真} + e_k$とする。
①より、$x_{k+1} = \phi(x_{真} + e_k)$。これをテイラー展開すると、

$$e_{k+1} = \Phi'(x_{真})e_k + \frac{\Phi''(x_{真})}{2}e_k^{\,2} + \ldots$$

$f(x_{真})=x_{真}$、かつ、$x_{k+1} = x_{真} + e_{k+1}$より、

$$e_{k+1} = \frac{\Phi''(x_{真})}{2}e_k^{\,2} + \ldots$$

$$\Phi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)} \Rightarrow \Phi'(x) = 1 - \frac{\{f'(x)\}^2 - f(x)f''(x)}{\{f'(x)\}^2}$$ より、$\phi'(x_{真})=0$

$$e_{k+1} \cong Ce_k^2 + O(e_k^3)$$

「2次収束」

Science of interactions

逐次法 vs ニュートン法

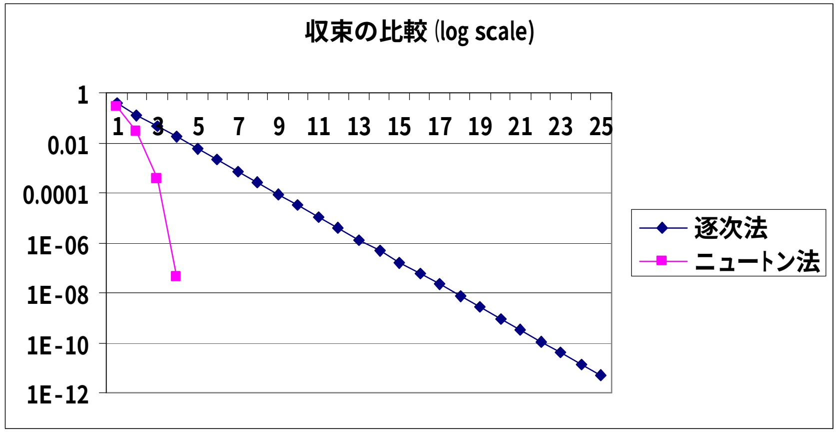
$e^{-x} - x^2 = 0$ を逐次法とニュートン法で解く。

$$x_{k+1} = \sqrt{e^{-x_k}}$$

$$x_{k+1} = x_k - \frac{e^{-x_k} - x_k^2}{-e^{-x_k} - 2x_k}$$

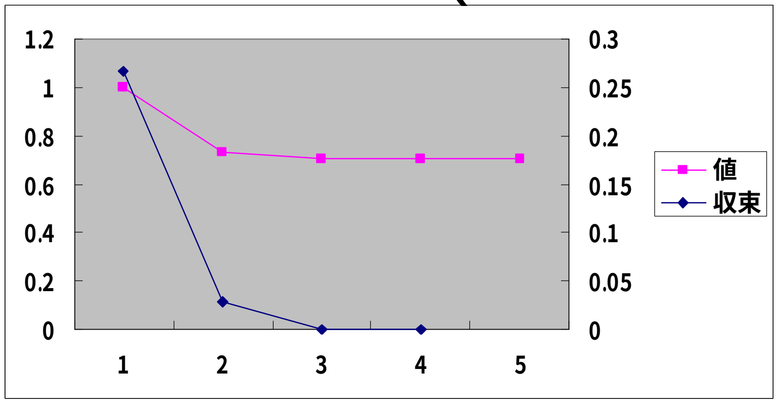
Science of interactions

逐次法　vs ニュートン法 数値実験の結果

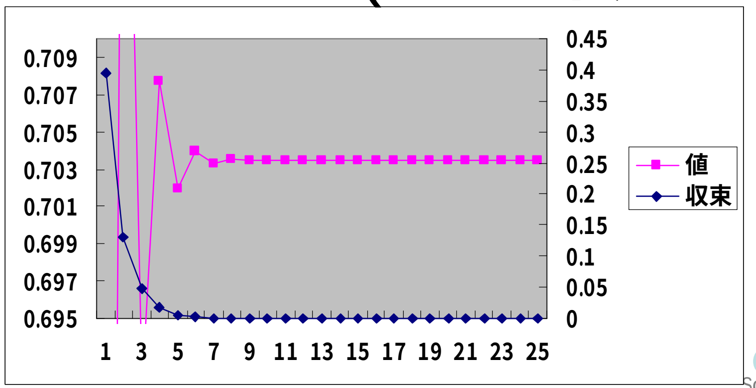


収束の比較

ニュートン法(2次収束)



逐次法(1次収束)



Science of interactions

収束の加速
Aitkenの加速法(デルタ2乗法)

ニュートン法はよい方法だが"微分"が必要
微分を使わないで、かつ、収束が速い方法は？

反復$\{x_n\}$が"**線形収束**"のとき、十分に大きいnに対して

$$x_{n+1}-\alpha \cong A(x_n-\alpha),\ x_{n+2} \cong A(x_{n+2}-\alpha)$$

としてもOK(αは解)。Aを消去すると、

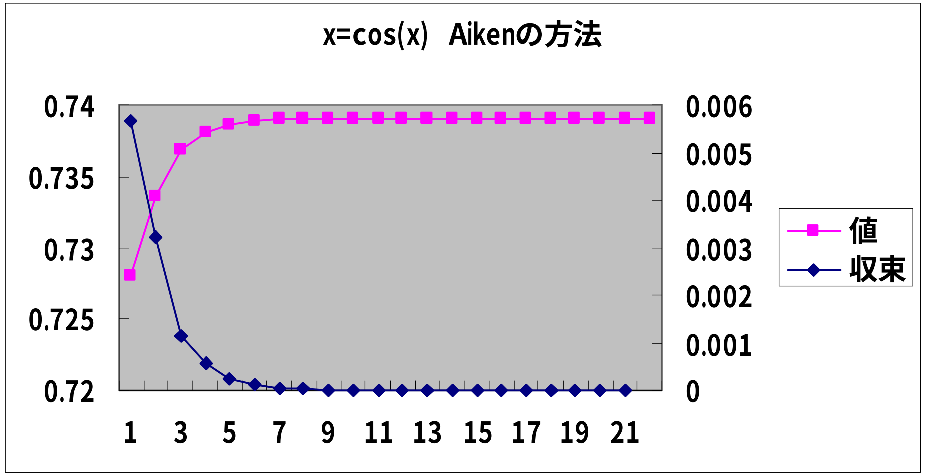
$$\alpha \cong x_n - \frac{(x_{n+1}-x_n)^2}{x_{n+2}-2x_{n+1}+x_n}$$ より

$$y_n = x_n - \frac{(x_{n+1}-x_n)^2}{x_{n+2}-2x_{n+1}+x_n}$$

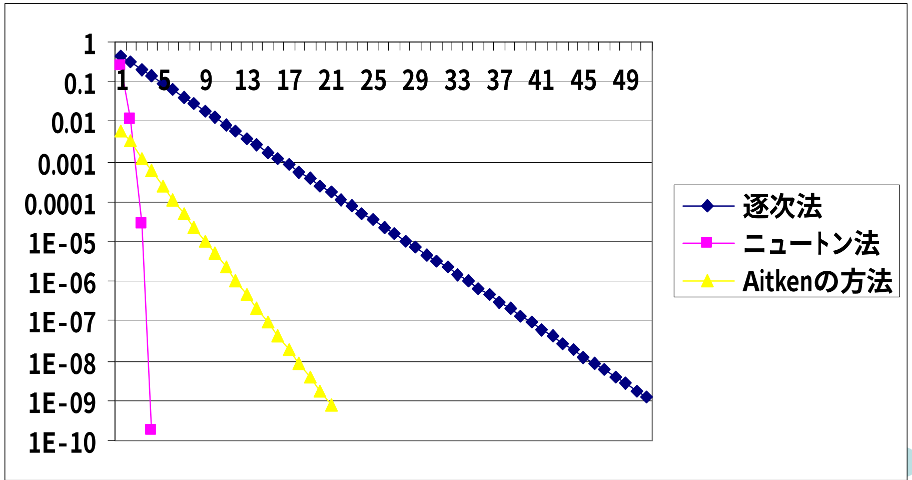
Aitkenの加速法
数値実験の結果

Aitkenの方法

x = cos (x)



収束の比較



Science of interactions

ステファンセンの方法

Aitkenの加速法は逐次法より収束が速いが
ニュートン法より収束が遅い
ステファンセンの方法はAitkenの加速法を援用して
微分をせずに2次収束を得られる方法である

$$y_n = \Phi(x_n)$$

$$z_n = \Phi(y)$$

逐次法

ステファンセンの方法

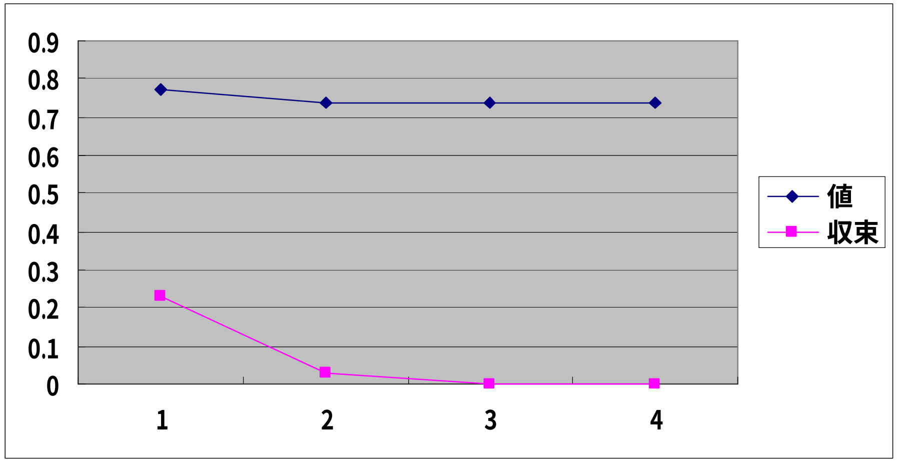
$$x_{n+1} = z_n - \frac{(z_n - y_n)^2}{z_{n+2} - 2y_n + x_n}$$

Aitkenの加速法

Science of interactions

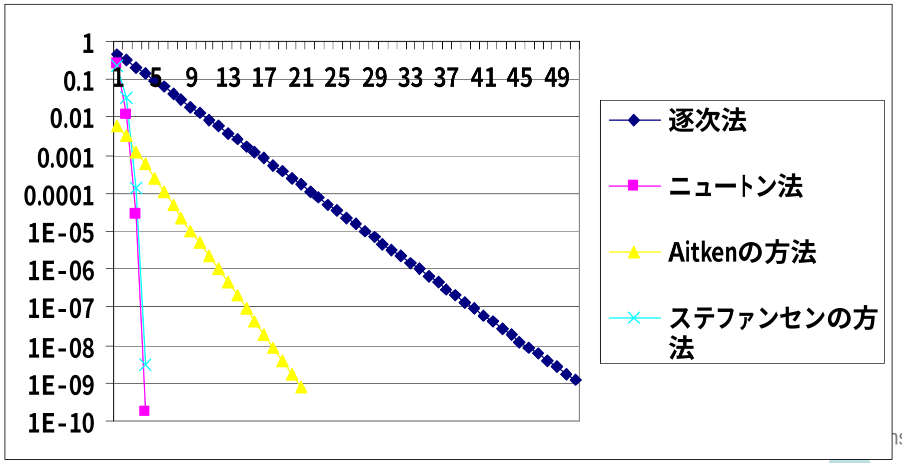
ステファンセンの方法
数値実験の結果

ステファンセンの方法



x = cos (x)

収束の比較



（数値）解析的な背景

これまで紹介してきた反復法には次のような解析的な背景がある。

定理1 閉区間 I から I への関数 g(x)が $x, y \in I$ ならば、

$$|g(x)-g(y)| \le L|x-y|, (0 \le L < 1)$$

要するに区間に"**比例**"して収縮するということ！

を満たすならば、gは I 内にただ一つの解 α を持ち、$x_{n+1} = g(x_n)$は α に収束する。
（このようなgは縮小写像 contractive mappingと呼ばれる）。
注)一般にこのような条件を満たすとき、gはリプシッツ(Lipschitz)条件を満たすといい、Lをリプシッツ定数をいう。

証明 解の存在と収束性の証明については、中間値の定理を用いた収束性の証明と同様であるので省略する。
解の唯一性の証明は、もし α 以外に解 β，β=g(β)があったと仮定すると、

$$|\beta-\alpha| = |g(\beta)-g(\alpha)| \le L|\beta-\alpha|$$

より、L＝1となり条件に矛盾することにより得られる。

縮小写像の原理を応用するポイントは**リプシッツ定数L＜1**である！

Science of interactions

解析的な背景（つづき）

系1　関数gが区間 I 上で微分可能で、$|g'(x)| \leqq L$　(xはIの区間にふくまれる)ならば、gはリプシッツ条件を満たす。

証明： 区間内の点x, yについて、平均値の定理を用いると、

$g(x) - g(y) = g'(\xi)(x - y)$ … ①

となるξが x と y のうちにとることができるので、ξも区間 I にふくまれる。

①の両辺の絶対値をとると、

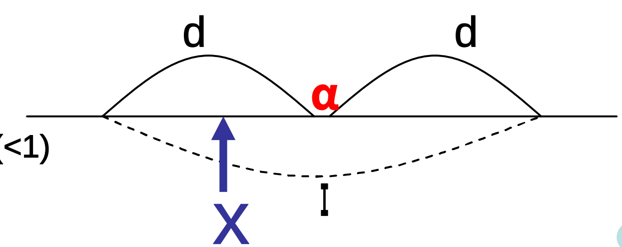
$|g(x) - g(y)| = |g'(\xi)(x - y)| \leqq L|x - y|$

よってgは $|g(x) - g(y)| \leqq L|x - y|$ なのでリプシッツ条件を満たす。

系2　$\alpha = g(\alpha)$とし、$I = [\alpha - d, \alpha + d]$ とする。I において、gがリプシッツ条件をみたし、Lがリプシッツ定数であるときに、任意のxが区間 I に含まれるならば、g(x)も I に含まれる。

証明： $|g(x) - \alpha| = \underbrace{|g(x) - g(\alpha)| \leqq L|x - \alpha|}_{\text{リプシッツ条件を満たすから}} \leqq Ld < d$。

Lはリプシッツ定数(<1)だから

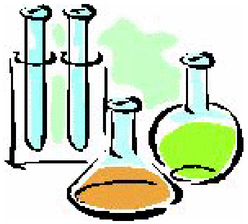


以上より、$\alpha = g(\alpha)$において、αの近くではgは縮小写像になることが、反復法が収束するための条件であることがわかる。

補間

- “ 補間 ” とは粗い数表しかなかった時代に数表に無い値を近似的に求めるために考えられたものである。非常に精緻に理論が作られている。
- 　数値計算のみならず、統計やコンピュータグラフィックスにも広く応用されている技法である。

線形補間



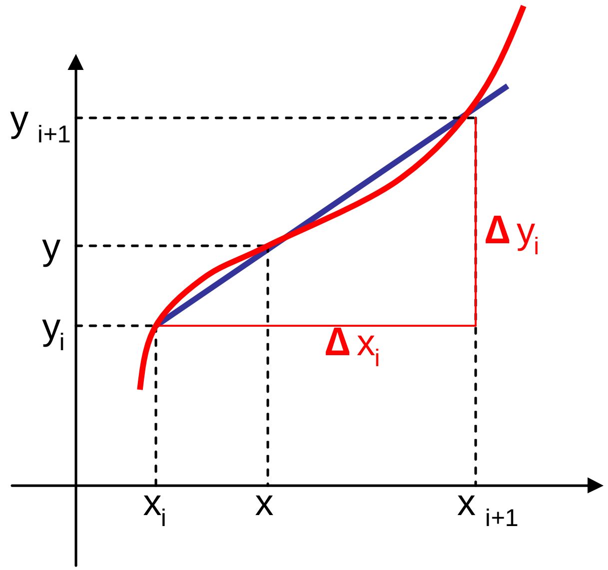
実験データ

離散値

T	2	3	4	5
V	3	4.5	6	7.5

? T=2.5の時のVを知りたい

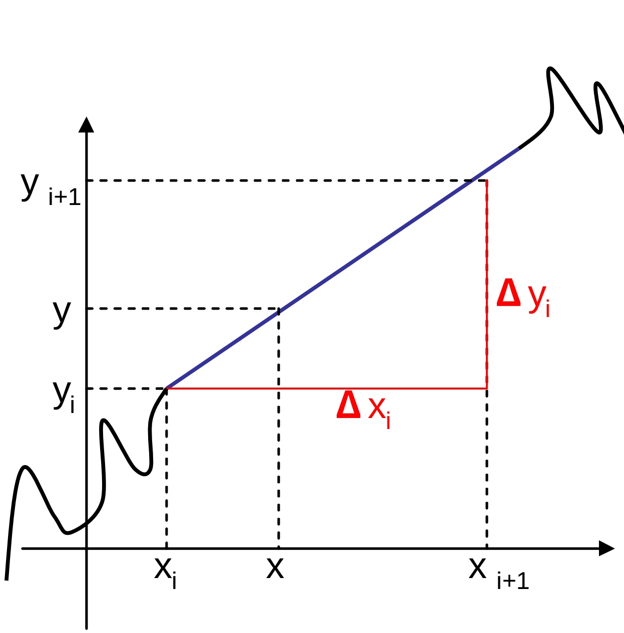
“補間”が必要



一番簡単な補間は線形補間
一般に誤差は分点と分点の間で大きく
分点に近ければ小さくなる。

Science of interactions

線形補間



xがx_iからx_{i+1}まで

$\Delta x = x_{i+1} - x_i$

だけ変化するとき、従属変数yは

$\Delta y = y_{i+1} - y_i$

だけ変化するので、変化率は

$$\frac{\Delta y_i}{\Delta x_i} = \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}$$

これと同じ比率で、x,yが変化していくとすると、

$$\frac{y - y_i}{x - x_i} = \boxed{\frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}} \rightarrow \left(\frac{\Delta y_i}{\Delta x_i} = \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \right)$$

より、

$$y = y_i + \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \cdot (x - x_i)$$

Science of interactions

2次補間

同様に3点(x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2)が与えられたとき、これを2次曲線

$p(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$ を用いて補間を行う。この場合 y=P(x)は$a_2 \neq 0$で放物線となる。

$$
\begin{aligned}
y_0 &= a_0 + a_1 x_0 + a_2 x_0^2 \\
y_1 &= a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 \\
y_2 &= a_0 + a_1 x_2 + a_2 x_2^2
\end{aligned}
$$

を用いて未知数a_0, a_1, a_2を求めることができる。

これを解くと

$$
P(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} y_0 + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} y_1 + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} y_2
$$

が得られる。

Science of interactions

一般の場合
n点の補間

$$P(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+\cdots+a_nx^n$$

命題: n点を通るn次多項式は唯一である。

証明: P(x)以外に与えられたn+1点を通るn次以下の多項式をQ(x)とする。すると、P(x)とQ(x)の差は、D(x)=P(x) -Q(x)となり、高々n次の多項式となる。

$D(x_k)=P(x_k)-Q(x_k)=f_k-f_k=0,\ k=0,1,2,\ldots,n$

となるので、D(x)はn+1の零点を持つ。しかし、代数学の基本定理より高々n次の多項式はnの零点しか持たない。よって、恒等的にD(x)=0となるから、
$P(x_k)-Q(x_k)=0$より、P(x)=Q(x).

別証明：P(x)**の係数行列は**n**次正方行列となる。この行列は**Vandermonde**行列式となるため、正則となり係数は一意に決まる。**

Science of interactions

ラグランジュ補間

一般にN＋1の場合関数 $l_j(x),(j=1,2,3,\ldots N)$**を以下のように定義する。**

$$\boxed{l_j(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{j-1})(x-x_{j+1})\cdots(x-x_N)}{(x_j-x_0)(x_j-x_1)\cdots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\cdots(x_j-x_N)}}$$

ここで$l_j(x)$**は、**

$$l_j(x)=\begin{cases}1 & (i=j)\\ 0 & (i\neq j)\end{cases}$$

を満たす。そこで、$P_N(x)$**を、** $P_N(x)=\sum_{j=0}^{N}y_j l_j(x)$ **と定義すると、高々N次の多項式となり、**

$$P_N(x_j)=y_j$$

を満たす。この多項式をラグランジュの補間多項式とよぶ。

⇒例を考えるとわかります。

Science of interactions

ラグランジュ補間

$$P_N(x) = \sum_{j=0}^{N} y_j l_j(x)$$

m=3の場合

$$p_3(x) = \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)} f_1 + \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)} f_2 + \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)} f_3$$

演習 $P_3(x)$**が**(x_1,f_1), (x_2,f_2),(x_3,f_3)**を通ることを確かめよ。**

Science of interactions

演習
ラグランジュ補間

演習: 以下のx_kとf_kに対する補間多項式を求めよ。

x_k	0	1	2
f_k	1	0	1

ヒント： m=3の場合のラグランジュ多項式

$$p_3(x) = \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)} f_1 + \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)} f_2 + \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)} f_3$$

Science of interactions

解答
ラグランジュ補間

演習: 以下のx_kとf_kに対する補間多項式を求めよ。

x_k	0	1	2
f_k	1	0	1

$$p_3(x) = \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)} f_1 + \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)} f_2 + \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)} f_3$$

より、

$$p_3(x) = \frac{(x-1)(x-2)}{(0-1)(0-2)}1 + \frac{(x-0)(x-2)}{(1-0)(1-2)}0 + \frac{(x-0)(x-1)}{(2-0)(2-1)}1$$

$$= \frac{1}{2}(x-1)(x-2) + \frac{1}{2}x(x-1) = (x-1)^2$$

Science of interactions

ラグランジュ補間の誤差

$$f(x) - P(x) = \frac{1}{(n+1)!}\pi(x) f^{n+1}(\xi)$$

$$\text{where}, \pi(x) = \prod_{k=0}^{n}(x - x_k)$$

証明の概略

$$H(x) = f(x) - P(x) - \pi(x)G(x)$$

$$\text{where}, G(x) = \frac{f(x) - P(x)}{\pi(x)}$$

とおくと、

$$H(x) = 0$$

$$H(x_k) = f(x_k) - P(x_k) - \pi(x_k)G(x_k) = 0$$

H(x)は$x, x_0, \ldots, x_n$のn+2の点で0となる。

Science of interactions

ラグランジュ補間の誤差（つづき）

ロルの定理より

$H'(z)$はn+1の異なる点で0となる

$H''(z)$はnの異なる点で0となる

$H'''(z)$はn-1の異なる点で0となる。

…

$H^{(n+1)}(\xi)=0$なるξが$x, x_0, x_1, \ldots, x_n$の区間内に存在する。

$$H(x) = f(x) - P(x) - \pi(x)G(x)$$

$$\text{where}, G(x) = \frac{f(x) - P(x)}{\pi(x)}$$

$H^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - \pi^{(n+1)}(\xi)G(x)=0$

また、$\pi^{(n+1)}(\xi)=(n+1)!$より、

$$G(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) \quad \cdots\cdots\cdots\blacktriangleright$$

$$H(x) = f(x) - P(x) - \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi)\pi(x) = 0$$

$$\boxed{f(x) - P(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi)\pi(x)}$$

Science of interactions

スプライン補間

ラグランジュ補間の場合はN+1個の点を通る曲線をN次多項式で生成した。しかし、点の数が多くなると隣り合う点との間で曲線が激しく振動する現象が現れる（自由度が増大することによる）。

区分的にm次のラグランジュ補間を行い、それらを滑らかにつなぐことにより自由度の増大に伴う振動を抑える。

そのため、以下の条件を課したもとでの補間を行う。

1. 曲線$y=s(x)$は連続であり、点(x_j, y_j) $(j=0,1,2,\dots N)$をすべて通る。
2. 区間の境目、すなわち、$x=x_j$ $(j=1,2,..N-1)$で$y=s(x)$の一階微分係数および二階微分係数が連続である。

Science of interactions

スプライン補間
3次スプライン補間の場合

実用上一番よく使われる3次スプライン補間を考える。その場合に、補間に用いる3次方程式は、

$$S_j(x) = a_j(x - x_j)^3 + b_j(x - x_j)^2 + c_j(x - x_j) + d_j \quad (j = 0,1,\ldots,N-1)$$

スプライン補間の条件を具体的に表すと、まず(1)の条件から
、

$S_j(x_j)=y_j$ (j=0,1,…,N-1)
$S_j(x_j+1)=y_j+1$ (j=0,1,…,N-1)

が導かれる。次に、(2)の条件から

$$S'_j(x_{j+1}) = S'_{j+1}(x_{j+1}) \quad (j = 0,1,2,\ldots,N-2)$$
$$S''_j(x_{j+1}) = S''_{j*1}(x_{j+1}) \quad (j = 0,1,2,\ldots,N-2)$$

が得られる。