

数値計算・Introduction

西谷@関学・理工・情報科学

07/10/5

1 講義の目的：数値計算を Maple で解説．

数値計算？

数値計算が対象とするのは、関数の解、積分、微分方程式、固有値問題などで、数学問題を解析的 (analytical) ではなく、数値的 (numerical) に解く手法の集大成．数値計算には、料理と同じで、正しい調理法 (レシピ, recipe) がある．

数値計算の基本的な考え方

数値計算が必要となる問題を解くときの戦術は、

1. 手持ちのツールで解いてみる、
2. 解析的な解を捜す、
3. 既存の数値計算のサブルーチンを写す、
4. 使いやすいライブラリを捜す、
5. 自分でサブルーチンを考える、

という順でおおむね進める．数値計算のサブルーチンを実際に自分で考えるということはほとんどない．しかし、例え 3. や 4. の既存のサブルーチンに頼るときにもブラックボックスの中で何がおこなわれているかを大まかに理解しておかないと大失敗をしでかすことになる．

といっても、数値計算の全てを理解しておく必要はない．料理において基本となる、切る、煮る、焼くなどを知っていれば、recipe を見ながら調理を進めていくことが可能である．数値計算においても同じで、基本となる誤差、精度、収束性、安定性、計算速度などの本質を理解しておけば新しい数値計算手法もだいたいの振る舞いを予測することが出来る．

本講義ではこのような視点にたつて、いくつかの典型的な数値計算手法の基礎的な考え方と実際のプログラムを紹介する．

Maple

- 前述の戦術 1. の手持ちのツールとして強力な” Maple”を講義では頻繁に使用する .
- Maple は昔の BASIC のようにコンパイルが必要ないので , コードを修正しながら結果を表示することが可能 .
- Maple は , 手続き型のスクリプトで C 言語を基礎としており , よく似ている .
- Maple は , 演習室にインストールされているだけでなく , 各自所有のパソコン (Win, Mac, Linux) にインストールできる . 希望者は西谷 (4 階 , 教授室 45) まで相談に来るように .
- C 言語への書き換えは自明と思われるので , 講義の中ではしない .

2 講義内容

本講義で扱う題材は ,

- 誤差
- 代数方程式 (二分法 , Newton-Raphson 法 , Bairstow-Hitchcock 法)
- 行列 , 固有値 (LU 分解 , Gauss 消去法 , Jacobi 法)
- 関数近似 (FFT, 非線形最小二乗法)
- 微分方程式 (Euler 法 , Runge-Kutta 法他)

を予定している .

3 成績評価 : 期末試験の結果でおこなう

- 実際にコンピュータを使ってプログラミングをする .
- テキストの持ち込み可 . ノートおよびレポートは自筆のみ認める .
- 演習課題は自習レポートとする . 試験はほぼ課題の範囲から出すので , 提出しておけばチェックが得られる .
- 授業中に課題を発表した場合は , ボーナス点をつける .
- 相当量の印刷物を配布予定 (200page 以上) . バインダーを用意しておくこと .
- 印刷物や連絡は <http://ist.ksc.kwansei.ac.jp/nishitani/Lectures/NumRecipe/index.html> に掲示 .

4 数値計算が必要となる具体例

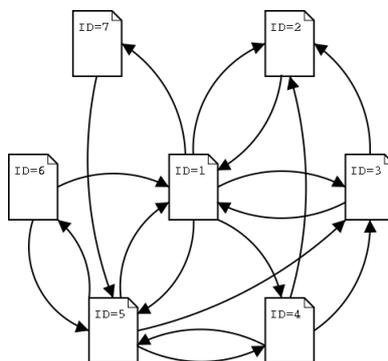
行列：ラジオシティ法

グラフィックスで物体の表面の光の反射を計算する方法の一つに、ラジオシティ法がある。ここでは、シーンの中の全ての物体の表面を「パッチ」と呼ばれる小さな領域に分割して、線形連立方程式を作る。このパッチの数は非常に多いため、数万行の行列式を解く必要がある。このような単品種大量計算に対しては、C 言語や Fortran と高速ライブラリーを用いた、並列クラスター計算が必要となる。

行列:Page rank の基本

多くの良質なページからリンクされているページはやはり良質なページである

Google の page rank は上のような非常に単純な仮定から成り立っている。ページランクを実際に求めよう。つぎのようなリンクが張られたページを考える。



計算手順は以下の通り¹。

1. リンクを再現する隣接行列を作る。ページに番号をつけて、その間が結ばれている i - j 要素を 1, そうでない要素を 0 とする。
2. 隣接行列を転置する
3. 列ベクトルの総和が 1 となるように規格化する。
4. こうして得られた推移確率行列の最大固有値に属する固有ベクトルを求め、適当に規格化する。

課題 1 上記手順を参考にして、Maple でページランクを求めよ。

課題 2 このような問題ではすべての固有値・固有ベクトルを求める必要はなく、最大の固有値を示す固有ベクトルを求めるだけでよい。初期ベクトルを適当に決めて、何度も推移確率行列を掛ける反復法でページランクを求めよ。

¹詳しくは <http://www.kusastro.kyoto-u.ac.jp/baba/wais/pagerank.html> を参照せよ。

参考文献

William H. Press 他著「ニューメリカルレシピ・イン・シー C 言語による数値計算レシピ」(技術評論社, 1993)

数値計算のバイブル．原著 Numerical recipe では非常に広範な計算対象に対して, C, Fortran, C++, Pascal, Basic 版が用意されており, 数値計算プログラムをコーディングする際の洗練されたスタイルも提示している．記述は初学者には難しいが, ある程度経験を積んだプログラマには, 手法を選ぶうえで非常に役に立つ情報である．

奥村晴彦著「C 言語による最新アルゴリズム事典」(技術評論社, 1991)

いわゆる数値計算に限らず, いろいろな計算機問題とその解法が載っている．数値計算についても必要最小限の記述とプログラムがまとめられており, 非常に便利．

数値解析法, 森正武著, 1984, 朝倉書店朝倉現代物理学講座 7

数値解析, 一松信著, 1982, 朝倉書店新数学講座 13

両書とも少し古いですが, 数値計算の基礎となる理論的な説明が明解．

河村哲也著「数値計算の初歩！」(山海堂, 2002 年)

レベルは高くないが, 重要な数値計算の初歩を丁寧に解説．