連続系アルゴリズムレポート課題9

- 宿題(レポート)
  - 提出状況に応じて，期末試験の点に最大 50 点を加算します
    - まったく提出しなくても，期末試験の点で成績が出ます
    - ただし，試験を受けなければ単位は出ません
  - プログラムだけはメールの添付ファイルで
    reiji@is.s.u-tokyo.ac.jp
    に送付してください
    - 所属学科，学年，学籍番号，氏名をメール本文に明記すること
    - メールの題名(Subject)は「連続系レポート課題第9回 提出者氏名」とすること
  - 手計算をするものや，計算結果と考察など，プログラム以外は A4 の紙 1 枚(裏もつかってよい)にまとめてください
    - 所属学科，学年，学籍番号，氏名をレポートの最初に明記すること
    - 次回の講義の前に集めます
    - あるいは PDF で A4 サイズ(ページ数任意)でもよい
- 問題1
  - K 点離散 Fourier 変換で，多項式 $p(x)$ のべき表現の係数がすべて実数の場合，
    - $p(\omega^0)$ と $p(\omega^{K/2})$ は実数であることを示せ
    - $h = 1, 2, \ldots, K/2 - 1$ に対して，$p(\omega^h)$ は $p(\omega^{K-h})$ の複素共役であることを示せ
- 問題2
  - イントロ(スライド1～2枚目)のような，2次元データの直線へのフィッティングを考える
  - 正規方程式を，x_i と y_i を用いて表現せよ
    - 行列・ベクトルにまとめず，要素ごとに表現せよ，ということ
  - 立てた正規方程式を解くプログラムを作れ
    - 2x2 の行列なら「解の公式」があることを思い出そう！
    - できれば，適当なデータでフィッティングさせてみよ

期末試験 1/23 持込不可

除算・初等関数の計算

範囲を正規化する
　逆数なら [1, 2) とか
　三角関数なら [0, π/2] とか

- 掛け算が遅い場合
  - 拡張筆算法，二分法，CORDIC など
    - 一松信：初等関数の数値計算(教育出版)に詳しい
- 掛け算が速い場合
  - Newton 法
    - 逆数：　$f(x) = \frac{1}{x} - a$　とすると割り算が必要ない
    - 平方根：　$f(x) = \frac{1}{x^2} - a$　で　$\frac{1}{\sqrt{a}}$　を求めて a 倍する
  - 三角関数などは，多項式・有理式近似
    - 二宮市三ほか：数値計算のつぼ(共立)などに実例
  - 逆数は　$\frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + x^3 + \cdots = (1+x)(1+x^2)(1+x^4)\cdots$

34

多項式の根を求める（代数方程式）

- ひとつだけ
  - Newton 法
  - 平野法（Newton 法の改良版で，必ず収束する）
- すべての根
  - Durand-Kerner 法，Ehrlich-Aberth 法
    - 多変数 Newton 法と考えることができる
    - Aberth の初期値
  - コンパニオン行列の固有値に帰着させる

35

ホモトピー法

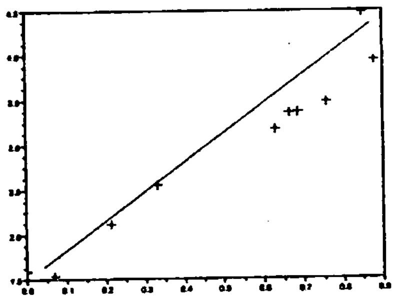
- 解きたい方程式：$f(x)=0$
- 解が分かっている適当な方程式：$g(x)=0$
- 二つを連続的につなぐ適当な関数

$$h(x,0)=g(x),\ \ h(x,1)=f(x)$$

  を構成する
- $h(x,t)=0$ は曲線群となるので，$t=0$ から曲線を追跡して $t=1$ に至れば $f(x)=0$ の解が得られる
  - 通常，これを初期値として Newton 法などで仕上げる

36

イントロ：直線へのフィッティング



イントロ：直線へのフィッティング

- 点と値のペア (x_i, v_i) に対して，直線を $y = a + bx$ として，誤差の二乗和

$$S = \sum_{i=1}^{n} \left(a + bx_i - v_i\right)^2$$

を最小にしたい

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{pmatrix}, \quad z = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \quad v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}, \quad S = \|Az - v\|_2^2$$

最小二乗問題

- A を $n \times m$ 行列で $\mathrm{rank}\, A = r$，b を n 元ベクトル，x は m 元ベクトルとする
- $n > m = r$ のとき
  - A は縦長の行列
  - $Ax = b$ は方程式の数が未知数よりも多い
    - 一般には，等号がなりたつ x は存在しない
- <u>最小二乗（自乗）問題</u>：$\|Ax - b\|_2$ を最小にする x を求める

最小ノルム問題

- $r = n < m$ のとき
  - A は横長の行列；$Ax = b$ を満たす x はたくさんある
  - <u>最小ノルム問題</u>：$Ax = b$ を満たし $\|x\|_2$ を最小にする x を求める
- $r < \min\{n, m\}$ のとき
  - $Ax = b$ を満たす x は一般には存在しない
  - $\|Ax - b\|$ を最小にする x はたくさんある
  - <u>最小二乗最小ノルム問題</u>：$\|Ax - b\|_2$ を最小にする x で $\|x\|_2$ を最小にするものを求める

最小二乗問題の解

- 以下，最小二乗問題に限る
  - 他の 2 つも，似たようなやり方で解くことができる
- 最小二乗問題

$$\|Ax-b\|_2 = (Ax-b)^T(Ax-b) = b^T b - 2x^T A^T b + x^T A^T Ax$$

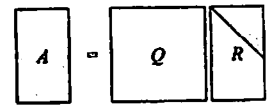
- 最右辺を x で微分して $=0$ とおくと

$$A^T Ax - A^T b = 0$$

- 正規方程式（normal equation）という

5

QR 分解

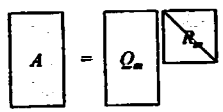


- QR 分解：$n\times m$ 行列 A で $n<m=\mathrm{rank}\,A$ に対し $A=QR$（Q: n 次直交行列，R: $n\times m$ 上三角行列）
- 最小二乗解法
  - $R^T Q^T Q R x = R^T Q^T b$ で $Q^T Q = I$ より
    $$R^T R x = R^T Q^T b$$
  - R の下の方が 0 であることを使えば R^T は消えて

1. $y = Q^T b$ を計算
2. z を y の上 m 要素分とする
3. $x = R_m^{-1} z$ が最小二乗解

6

QR 分解の作り方



- Gram-Schmidt の直交化
  - アルゴリズムは分かりやすい
  - 「修正 Gram-Schmidt 法」でないと精度が出ない
  - $n\times m$ 行列の Q_m と，$m\times m$ 行列の R_m の積
- Householder 変換
  - 現在の標準手法
  - Q は Householder 変換の積として implicit に得られる
- Givens 変換
  - Updating などに使う

7

高速数値計算アルゴリズム

- FFT の仲間（高速 cosine 展開など），$O(N\log N)$，厳密
- Karatsuba 法
  - N 次の多項式の積など，$O(N^{1.5})$，厳密，FFT より省メモリ
- Strassen のアルゴリズム
  - N 次の正方行列積など，およそ $O(N^{2.807})$，厳密
- Barnes-Hut 法
  - N 個の質点間で働く力，$O(N\log N)$，近似（低精度）
- 高速ウェーブレット変換（FWT），$O(N)$ など，近似
- 低階数近似（Low rank approximation）
  - $N\times N$ 行列とベクトルの積，$O(kN)$，近似
    - 一般化 FMM や H matrix 法などの応用あり
- 高速多重極子展開法（FMM）
  - N 個の質点間で働く力，$O(N)$，近似（高精度）

8

連続系アルゴリズム 1/10

離散フーリエ変換

$K = 2^k$

$w = e^{-2\pi i/K}$ ← 1のK乗根.

cf. $w^K = 1$

$w^{\frac{K}{2}} = -1$

$w^{\frac{K}{4}} = -i$

$w^{\frac{3}{4}K} = i$

$w^{K+h} = w^h$

離散フーリエ変換 (DFT)

べき表現のK-1次多項式 $p(x)$ に対し、

$p(w^h)$ をすべて求める $(h = 0, 1, 2, \ldots, K-1)$

高速フーリエ変換 (FFT)

- $p(x)$ を偶数次と奇数次にわける

$$p(x) = \underbrace{q(x^2)}_{\frac{K}{2}-1\text{次}} + x\underbrace{s(x^2)}_{\frac{K}{2}-1\text{次}}$$

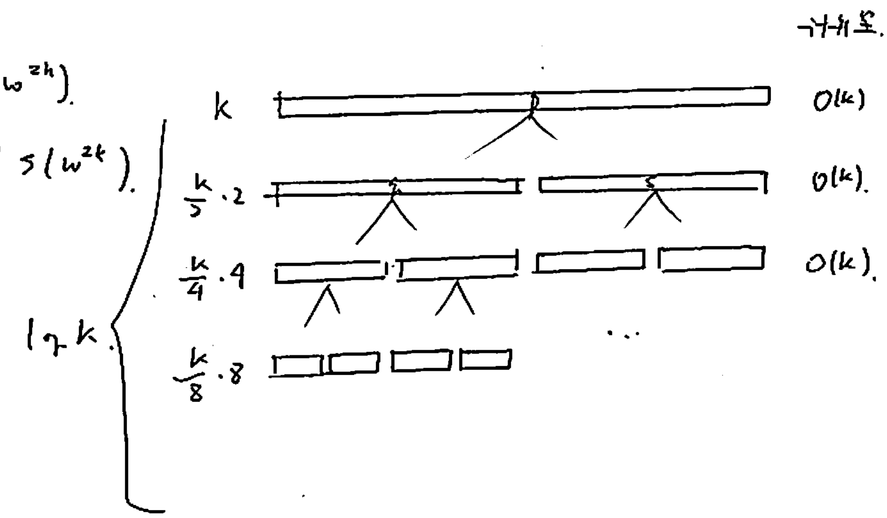
- 再帰的に

$q(w^{2h}),\ s(w^{2h}) \to h = 0, 1, \ldots, \frac{K}{2} - 1$

- $p(w^h) = q(w^{2h}) + w^h s(w^{2h})$

$p(w^{h+\frac{K}{2}}) = q(w^{2h}) - w^h s(w^{2h})$

合計の計算量 $O(K \log K)$



逆高速フーリエ変換（IFFT）

$p(\omega^h)$ の値 $(h=0,1,\cdots,k-1)$ が分かるとき、

多項式 $p(x)$ の係数をすべて求める。

分割統治法では

- $p(x) = q(x^2) + x\,s(x^2)$
- 次の2つの式から $q(x^2)$ と $s(x^2)$ が分かる。

$$p(\omega^h) = q(\omega^{2h}) + \omega^h s(\omega^{2h})$$

$$p(\omega^{h+\frac{k}{2}}) = q(\omega^{2h}) - \omega^h s(\omega^{2h})$$

を連立すれば。

応用(1) 多項式の積

$$p(x)\cdot q(x) = \underbrace{r(x)}_{k-1\text{次以下}}$$

① $p(\omega^h)$, $q(\omega^h)$ をFFTで求める　　$O(k\log k)$

② $r(\omega^h) = p(\omega^h)\cdot q(\omega^h)$　　$O(k)$

③ IFFTで $r(x)$ の係数を求める　　$O(k\log k)$

合計 $O(k\log k)$ でできる。

応用(2) 巡回畳み込み

$p(x)$, $q(x)$ を $k-1$ 次多項式とする。

応用(1)と同じ計算をする。

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

$$q(x) = b_0 + b_1 x + \cdots + b_{k-1}x^{k-1}$$

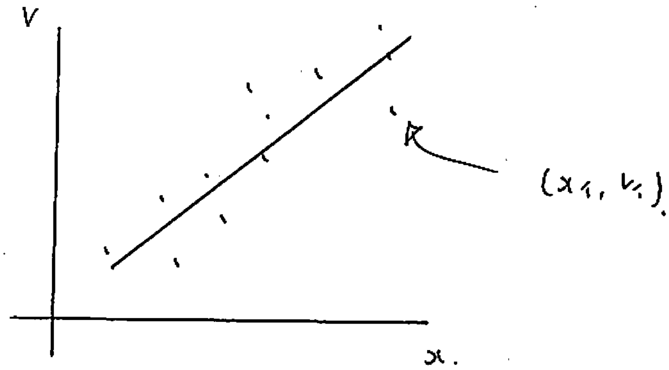
$$r(x) = c_0 + c_1 x + \cdots + c_{k-1}x^{k-1}$$

$$c_h = \sum_{n+m=h} a_n b_m + \sum_{n+m=k+h} a_n b_m = \sum_{n=0}^{k-1} a_n b_{h-n}$$

b_{-i} のとき、b_{k-i} とする。

巡回。

最小二乗法.



$$S = \sum (a + bx_i - v_i)^2$$

を最小化する.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}.$$

then $S = \| A\mathbf{x} - \mathbf{v} \|^2$

→ $\| A\mathbf{x} - \mathbf{v} \|^2$ を最小にする $\mathbf{x}$ を求める.

$$(A\mathbf{x} - \mathbf{b})^T (A\mathbf{x} - \mathbf{b})$$
$$= \mathbf{x}^T A^T A \mathbf{x} - 2\mathbf{x}^T A^T \mathbf{b} + \mathbf{b}^T \mathbf{b}$$

$\mathbf{x}$ で微分.

$$2A^T A \mathbf{x} - 2A^T \mathbf{b} = 0 \quad \text{となる.}$$

$$\boxed{A^T}\boxed{A}\boxed{\mathbf{x}} = \boxed{A^T}\boxed{\mathbf{b}}$$

$$\boxed{A^T A}\boxed{\mathbf{x}} = \boxed{A^T \mathbf{b}}$$ 正規方程式.

※ A^TA を作ってLU分解はあまりおすすめしない.

条件数がほぼ2乗.

- QR分解.

$$A = QR$$

Q → 直交　　R → 上三角

$$\boxed{A} = \boxed{Q}\,\boxed{R} = \boxed{Q_m}\,\boxed{R} \qquad Q_m^T Q_m = I.$$

$$A^T A x = A^T b$$

$$R^T Q^T Q R x = R^T Q^T b$$

$$R^T R x = R^T Q^T b$$

$$R^T_m R_m x = R_m^T Q_m^T b.$$

R_m は正則なので.

$$R_m x = Q_m^T b.$$

解: 後退代入でとける.