2005年4月13日（水）

2005年度
数値解析講義　前期水曜3限

青柳　睦

aoyagi@cc.kyushu-u.ac.jp

研究室：情報基盤センター5階500，502

講義内容

｛括弧｝の項目はSkipまたは参考程度

1．超越方程式（非線形方程式）の解法

1．1　2分法　→　演習

1．2　｛補間法｝

1．3　ニュートン法　→　演習

2．代数方程式の解法

2．1　グラーフェの方法　→　（演習）

2．2　｛ベルヌーイの方法｝

3．連立一次方程式の解法

3．1　行列計算　→　演習

3．2　ガウスの消去法　→　演習

3．3　3重対角行列の場合の解法

3．4　LU分解法　→　演習

講義vs演習スケジュールに余裕がある日を見つけて，「数値解析」を必要とする理学工学(社会学？)分野で活用されている計算科学の概論を紹介します（予定）．

3．5　特異値分解法

3．6　共役勾配法

3．7　反復法

4．固有値と固有ベクトルの近似計算

4．1　レバリエールの方法

4．2　3重対角行列の固有値と固有ベクトルの計算

4．3　ランチョスの方法（3重対角行列への帰着）

4．4　ギブンスの方法（対称な3重対角行列への帰着）

4．5　ヤコビの方法（対角行列への帰着）

5．ラグランジュの未定乗数法

6．勾配法

6．1　最急降下法

6．2　最急降下加速法

6．3　ステップ幅の決め方

4章 「固有値‥」以降は，講義と演習の進捗状況によっては項目を絞った内容にする可能性があります‥．

成績評価，その他

- 出席点５割＋前期末試験５割
- 講義ノートは，毎回配りますが
  もし欠席したら各自でDLしてください
  server-500.cc.kyushu-u.ac.jp
  (講義ノートはその週の土曜日深夜までには公開予定)
- 次回から座席指定でお願いします
  ３０分後には座席表から出欠を取ります
- 研究室の電話は 092-642-3838
- メールは，aoyagi@cc.kyushu-u.ac.jp
  Subjectには，「数値解析」と記入
  してください

非線形方程式

方程式

$$f(x)=0$$

の解を求める。

$f(x)$がxに関する１次関数ならば解は簡単に求まる。

$$f(x)=ax+b \qquad x=-b/a$$

$f(x)$がxに関する１次関数以外の場合 ➡ 非線形方程式

$$f(x)=(ax^2+b)\log x-c$$

非線形方程式

方程式

$$f(x)=0$$

の解を求める。

4次以下の代数方程式では、"根の公式"が存在する。

例えば2次方程式では、

$$ax^2+bx+c=0 \qquad x=\frac{-b\pm\sqrt{b^2-4ac}}{2a}$$

例えば4次方程式では、フェラリの公式 (Ferrari's formula)

$x+\log x=0$

$(ax^2+b)\log x-c=0$

一般の非線形方程式 ⇒ **解を求める公式が存在しない。**

⇓

近似的解法（コンピュータ）を使って強引に解く

逐次近似（ちくじきんじ） ⇒ **数値計算のあらゆる分野に応用できる最も基本的で有力な手法**

逐次近似

逐次法に共通する一般的な考え方

真の値を求めるのではなく、「なるべく真の値に近い値」を求める。
(精度の良い近似値を求める。)

「1つの近似値が見つかったら、それを使ってもっと精度の良い近似値を計算する公式を」作る。

まず、1つの近似値を見つけ、それにこの公式を適用し、その結果をまたこの公式に入れ、これを何度も繰り返す。

最終的に実用上十分な精度の解が得られる。

計算科学的な観点からは・・
「逐次法」は　問題サイズ(n) に対する演算量の正確な予測が得にくい，一方，「直接法」は演算量が明確に決まる場合が多い・・
e.g. $O(n^2)$, $O(\log n)$　etc．

５次方程式を解く

５次方程式

$$x^5+0.1=x^4+x^2+x$$

を解く。

⇒ **グラフを描いて解く**

まず、

$$f(x)=x^5-x^4-x^2-x+0.1$$

の値を$x=0.0$から0.01おきに2.0まで表を作って計算し、グラフにプロットする。

$f(x)=x^5-x^4-x^2-x+0.1$　　*x=0.0*から*0.01*おきに*2.0*まで計算

```
#include<stdio.h>
#include<math.h>
main()
{
        float x;
        float y;

        for(x=0.0; x<=2.0; x=x+0.01){
                y=pow(x,5)-pow(x,4)-pow(x,2)-x+0.1;
                if((y<0.01)&&(y>-0.01)){
                        printf("x=%5.2f¥ty=%5.3f¥n",x,y);
                }
        }
}
```

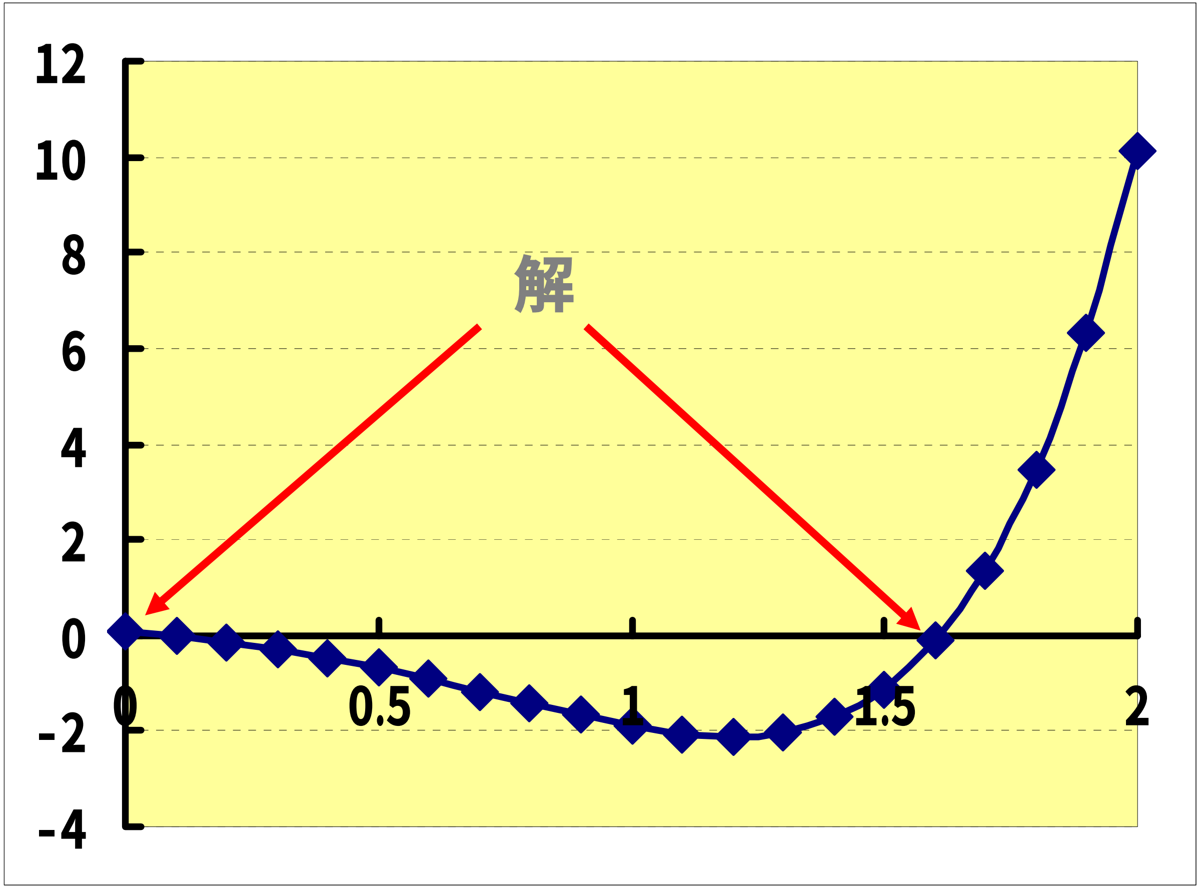
yの値がゼロに近づいたら、xの値を出力

グラフを描く

原始的で強引なやり方

x	f(x)
0	0.100
0.1	-0.010
0.2	-0.141
0.3	-0.296
0.4	-0.475
0.5	-0.681
0.6	-0.912
0.7	-1.162
0.8	-1.422
0.9	-1.676
1	-1.900
1.1	-2.064
1.2	-2.125
1.3	-2.033
1.4	-1.723
1.5	-1.119
1.6	-0.128
1.7	1.356
1.8	3.458
1.9	6.319
2	10.100

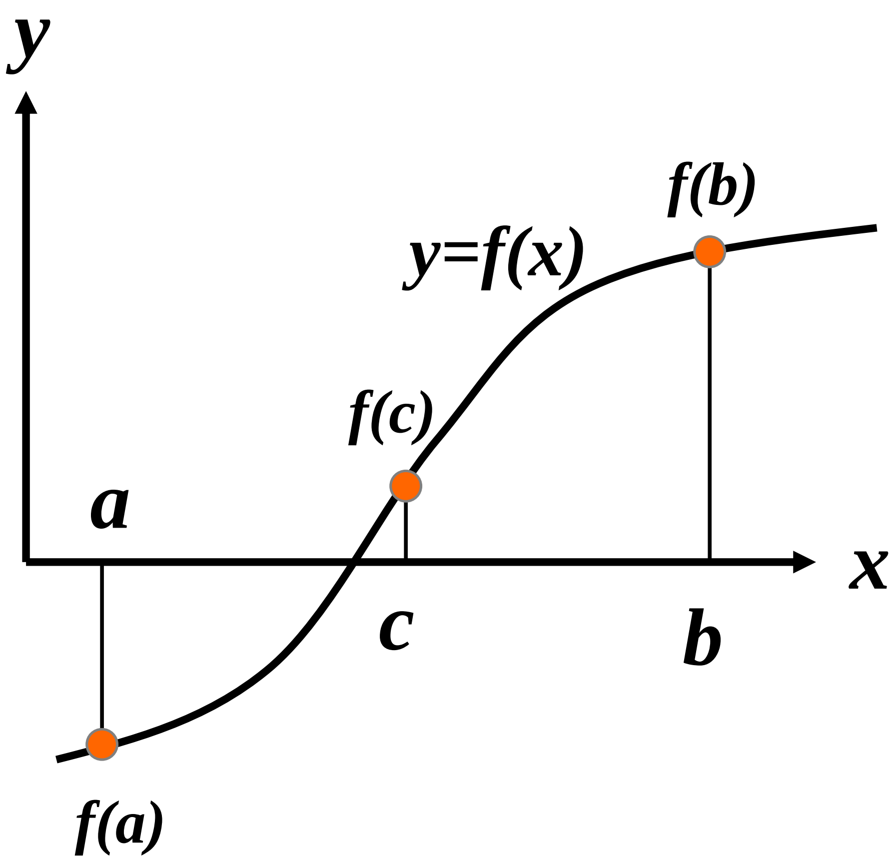
$$f(x)=x^5-x^4-x^2-x+0.1$$



2分法

「aとbの間に必ず根があってその個数は一つ」

aとbの中点にcをとる。　そして根が



① aとcの間にある。

② ちょうどcのところにある。

③ cとbの間にある。

$f(c)$を計算し、

$f(a)$と$f(c)$が異符号 ➡ ①

$f(a)$と$f(c)$が同符号 ➡ ③

$f(c)=0$ ➡ ②

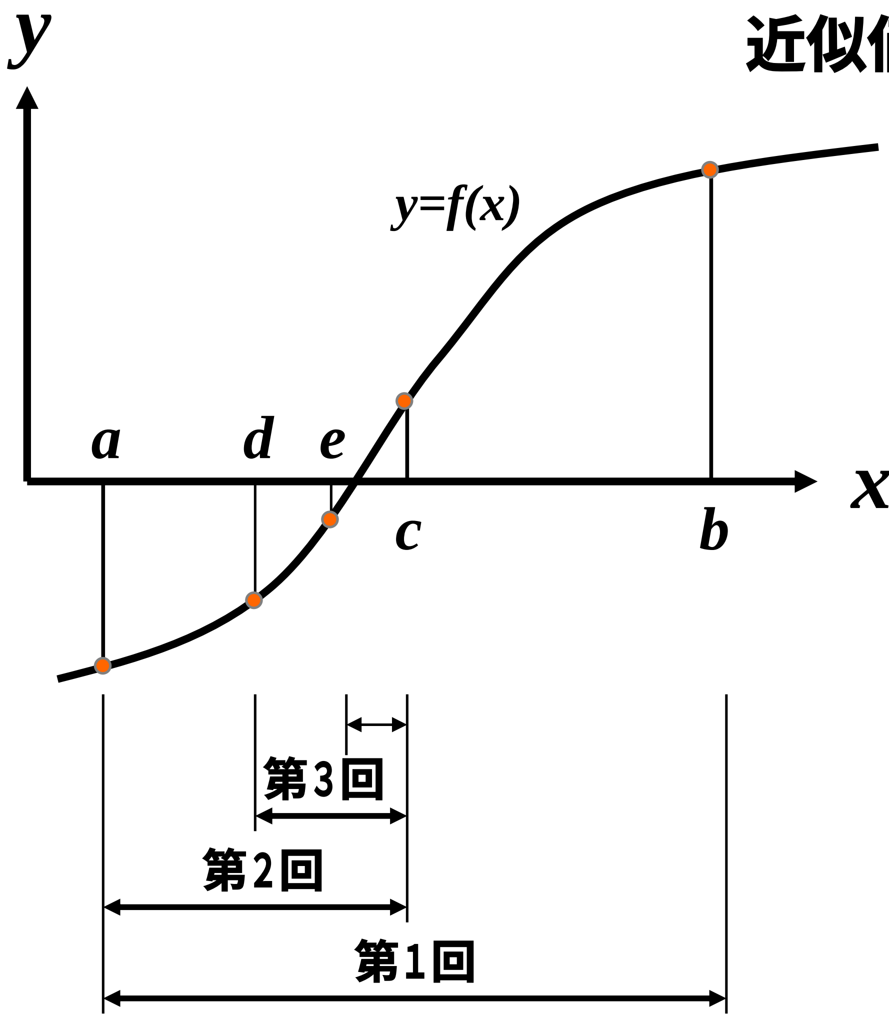
根の存在する範囲を狭めていく。(領域削除法)

2分法

根の存在する範囲を狭めていき、

範囲がある程度以上小さくなったら、

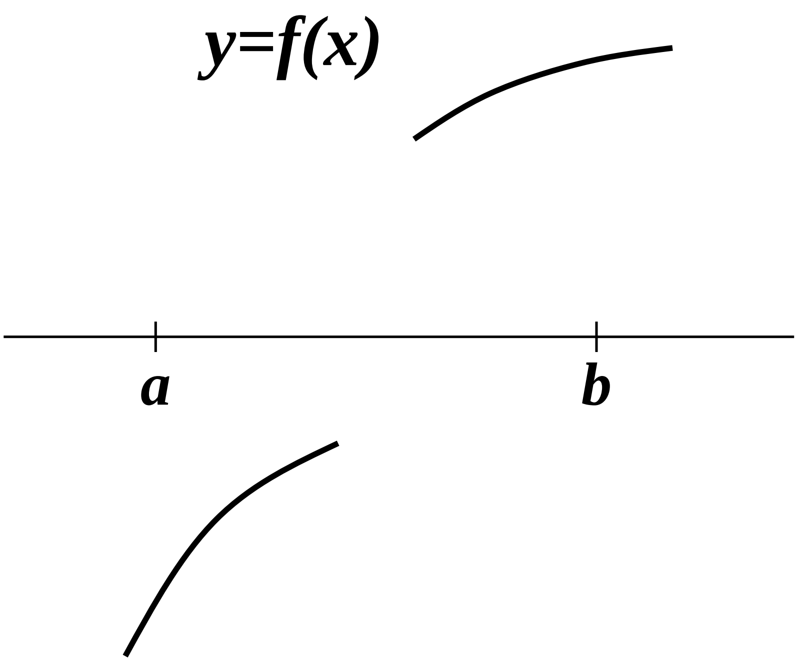
近似値が求まったものとする。

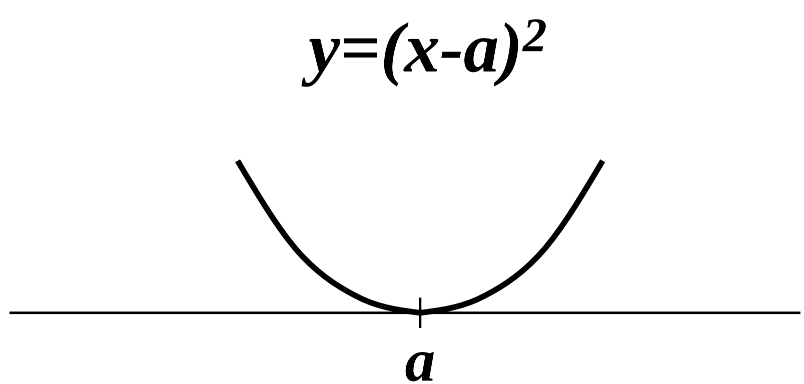


*f(x)*を計算しているが、
符号しか利用していない。

2分法が適用できない例

- 関数$f(x)$が不連続な場合
- 方程式が偶数乗根をもつ場合





補間法

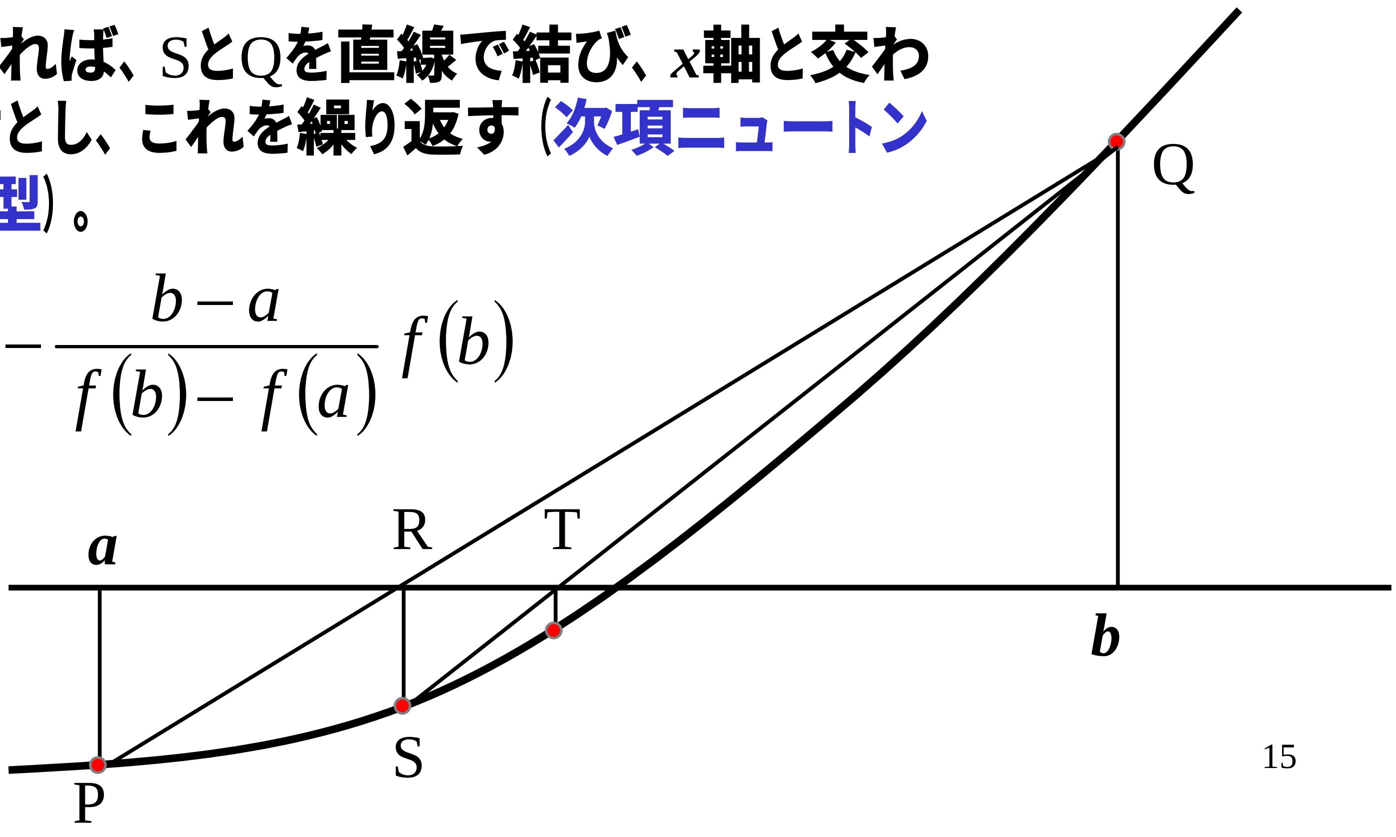
***f(x)*の絶対値も利用**

PとQを直線で結び、*x*軸と交わる点をRとする。

R点での*f(x)*を計算し、*f(x)=0*であれば、その点が根となる。

0でなければ、SとQを直線で結び、*x*軸と交わる点をTとし、これを繰り返す（次項ニュートン法の原型）。

$$x_R = b - \frac{b-a}{f(b)-f(a)} f(b)$$



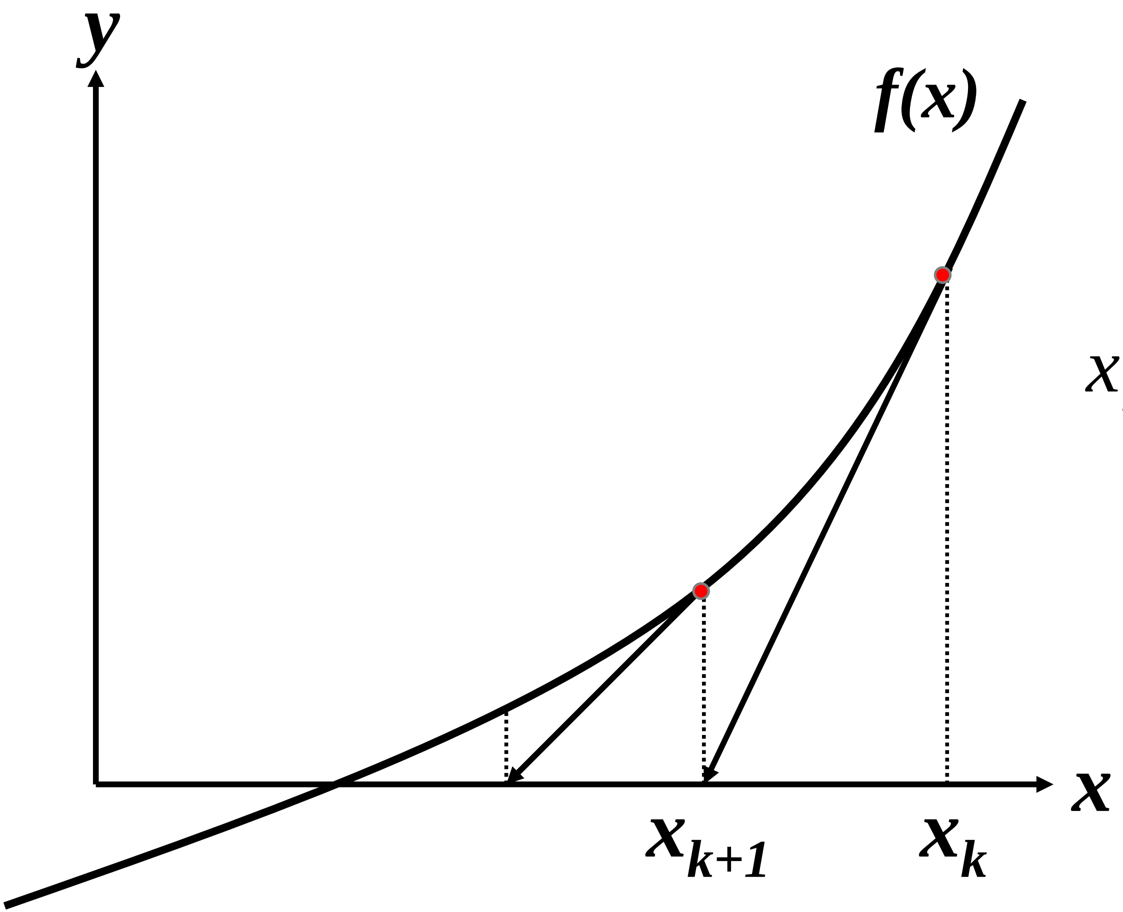
ニュートン(またはNewton-Raphson)法

微係数(勾配)を使う。

$$f(x) = f(x_k) + \frac{f'(x_k)}{1!}(x - x_k) + \frac{f''(x_k)}{2!}(x - x_k)^2 + \ldots$$

高次の項は無視

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



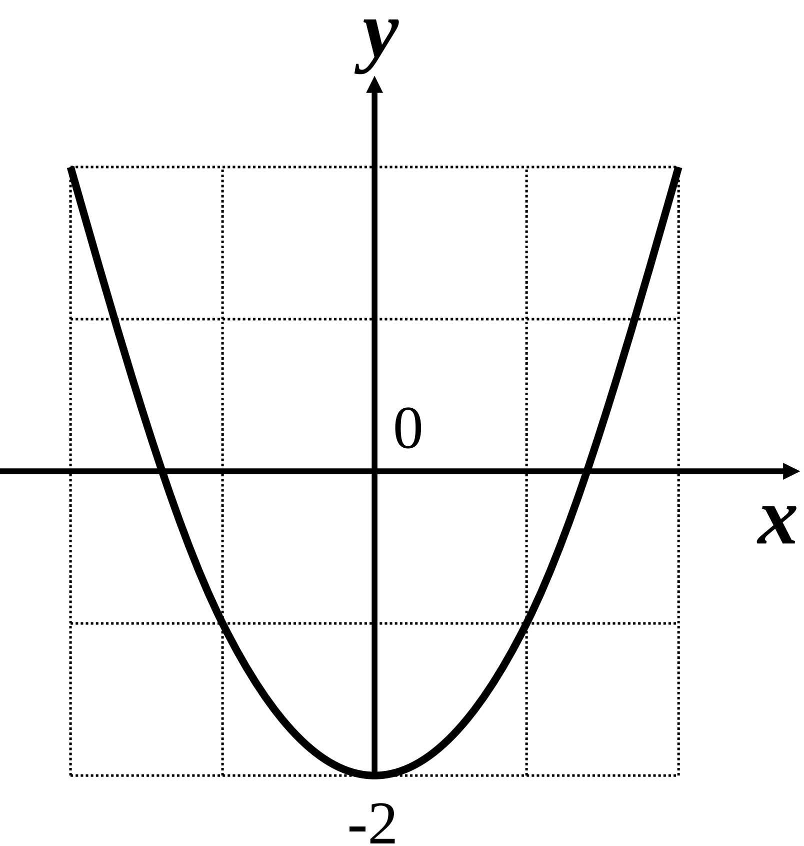
$$f\left(x,y\right)=f\left(x_k,y_k\right)+\left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{(x_k,y_k)}\left(x-x_k\right)+\left.\frac{\partial f}{\partial y}\right|_{(x_k,y_k)}\left(y-y_k\right)+\ldots$$

$$g\left(x,y\right)=g\left(x_k,y_k\right)+\left.\frac{\partial g}{\partial x}\right|_{(x_k,y_k)}\left(x-x_k\right)+\left.\frac{\partial g}{\partial y}\right|_{(x_k,y_k)}\left(y-y_k\right)+\ldots$$

Newton-Raphson法の例題

$\sqrt{2}$ をNewton-Raphson法で求める。（初期値x_0=2）

$$f(x)=x^2-2$$



$$x_1 = x_0 - \frac{f\left(x_0\right)}{f'\left(x_0\right)} = 2 - \frac{2}{4} = 1.5$$

$$x_2 = x_1 - \frac{f\left(x_1\right)}{f'\left(x_1\right)} = 1.5 - \frac{0.25}{3} = 1.4147$$

$$x_3 = 1.4147 - \frac{0.0014}{2.829} = 1.4142$$

ニュートン法の復習 (参考1)

1変数非線形方程式

$$f(x) = 0$$

を解く方法。

ニュートン法の原理

$f(x)$ **の** $x = \underline{x}$ **のまわりのテイラー展開**

$$f(x) = f(\bar{x}) + f'(\bar{x})(x - \bar{x}) + \cdots$$

より

$$0 = f(x) = f(\bar{x}) + f'(\bar{x})h$$

これを解くと

$$h = -\frac{f(\bar{x})}{f'(\bar{x})}$$ ： 補正量

$$\tilde{x} = \bar{x} + h = \bar{x} - \frac{f(\bar{x})}{f'(\bar{x})}$$

反復式

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})}, \quad k = 0, 1, \ldots$$

$x^{(0)}$: 初期値

☆収束は速い（2次収束）。しかし、初期値を解の近くにとらなければならない。

➢方程式が偶数乗根をもつ場合にも適用可

例　$f(x) = x - \cos x$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{x^{(k)} - \cos x^{(k)}}{1 + \sin x^{(k)}}, \quad k = 0, 1, \ldots$$

（参考2）　多変数への応用

理学工学の分野では重要！

2変数非線形連立方程式

$$f(x, y) = 0,$$
$$g(x, y) = 0$$

の場合は、ニュートン法は

$$\begin{pmatrix} x^{(k+1)} \\ y^{(k+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^{(k)} \\ y^{(k)} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \dfrac{\partial f}{\partial x}(x^{(k)}, y^{(k)}) & \dfrac{\partial f}{\partial y}(x^{(k)}, y^{(k)}) \\ \dfrac{\partial g}{\partial x}(x^{(k)}, y^{(k)}) & \dfrac{\partial g}{\partial y}(x^{(k)}, y^{(k)}) \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} f(x^{(k)}, y^{(k)}) \\ g(x^{(k)}, y^{(k)}) \end{pmatrix}$$

となる。

実際には、**逆行列**の計算は行わなわず、
連立一次方程式

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x}(x^{(k)}, y^{(k)}) & \frac{\partial f}{\partial y}(x^{(k)}, y^{(k)}) \\ \frac{\partial g}{\partial x}(x^{(k)}, y^{(k)}) & \frac{\partial g}{\partial y}(x^{(k)}, y^{(k)}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} f(x^{(k)}, y^{(k)}) \\ g(x^{(k)}, y^{(k)}) \end{pmatrix}$$

を解いて h_1, h_2 を求め、更新

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + h_1,$$

$$y^{(k+1)} = y^{(k)} + h_2$$

を行い、これを**繰り返す。**

n変数非線形連立方程式

$$
\begin{aligned}
f_1(x_1, x_2, \ldots, x_n) &= 0, \\
f_2(x_1, x_2, \ldots, x_n) &= 0, \\
&\vdots \\
f_n(x_1, x_2, \ldots, x_n) &= 0
\end{aligned}
$$

の場合は、簡単のために、記号

$$
x = (x_1, x_2, \ldots, x_n), \qquad f = (f_1, f_2, \ldots, f_n)
$$

を導入し、上の方程式を

$$
f(x) = 0
$$

と書く。

この場合、ニュートン法は

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - H(x^{(k)})^{-1} f(x^{(k)})$$

と書ける。ただし、

$$H(x^{(k)}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(x^{(k)}) & \frac{\partial f_1}{\partial x_2}(x^{(k)}) & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(x^{(k)}) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}(x^{(k)}) & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}(x^{(k)}) & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n}(x^{(k)}) \\ & \cdots & & \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1}(x^{(k)}) & \frac{\partial f_n}{\partial x_2}(x^{(k)}) & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n}(x^{(k)}) \end{pmatrix}$$

$x^{(k+1)}, \quad x^{(k)}, \quad f(x^{(k)})$ は n次元ベクトルで

であることに注意。

もちろん、実際には、連立一次方程式

$$H(x^{(k)})\,h = -f(x^{(k)})$$

を解き、補正

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + h$$

を行い、これを繰り返す。

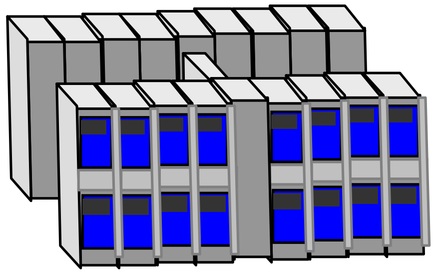
今日はここまで‥

コンピュータ科学の発展とその方向

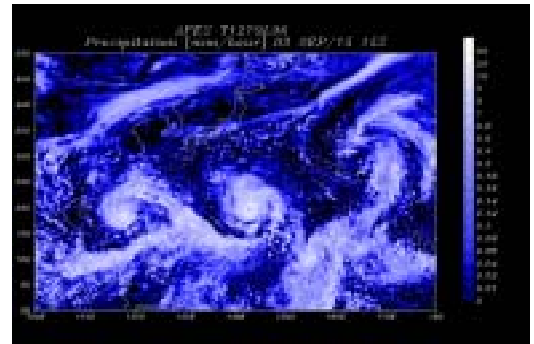
社会科学, 情報科学, ‥

理学, 工学, ‥, バイオ‥

人間の模倣



自然の模倣



人間の思考 ⇐ コンピュータ ⇒ 自然現象

応用
基礎

ゲーム
エキスパートシステム
情報検索
ヒューマン インターフェース
音声認識
データマイニング
画像認識
ニューラルネット
ロボット
感性処理
自然言語理解
マルチエージェント
プランニング
推論
探索
知識表現
機械学習
遺伝アルゴリズム

応用
基礎

磁気流体
格子ゲージ理論
分子動力学法
量子モンテカルロ法
バンド計算
量子色力学
相対論
密度汎関数法
電磁気学
量子力学
分子軌道法
古典力学
流体力学
有限(境界)要素法