計算物理学B

第14回

野垣 康介、藤本 悠輝

講義予定

10/07 両名:四則演算
10/14 野垣:制御文(for, if)
10/21 野垣:関数
10/28 藤本:配列(numpy)
11/04 藤本:可視化(matplotlib)
11/11 野垣:数値微分
11/18 藤本:数値積分

〜中間レポート〜

12/09 野垣:モンテカルロ1
12/16 野垣:モンテカルロ2
12/23 藤本:微分方程式1
01/13 藤本:微分方程式2
01/20 藤本:偏微分方程式1
01/27 藤本:偏微分方程式2
02/03 野垣:根の探索

〜期末レポート〜

はじめに

授業で用いるリンクをまとめておきます。

Google Colab

https://colab.research.google.com/?hl=ja

GitHub

https://github.com/nogaki/Computational_Physics_B

GitHub（今週の教材）

https://github.com/nogaki/Computational_Physics_B/tree/main/week14

はじめに

GitHubからGoogle Colabへのノートブックの取り込みについて

Colabの画面で
[ファイル]→[ノートブックを開く]→タブ[GitHub]をクリック

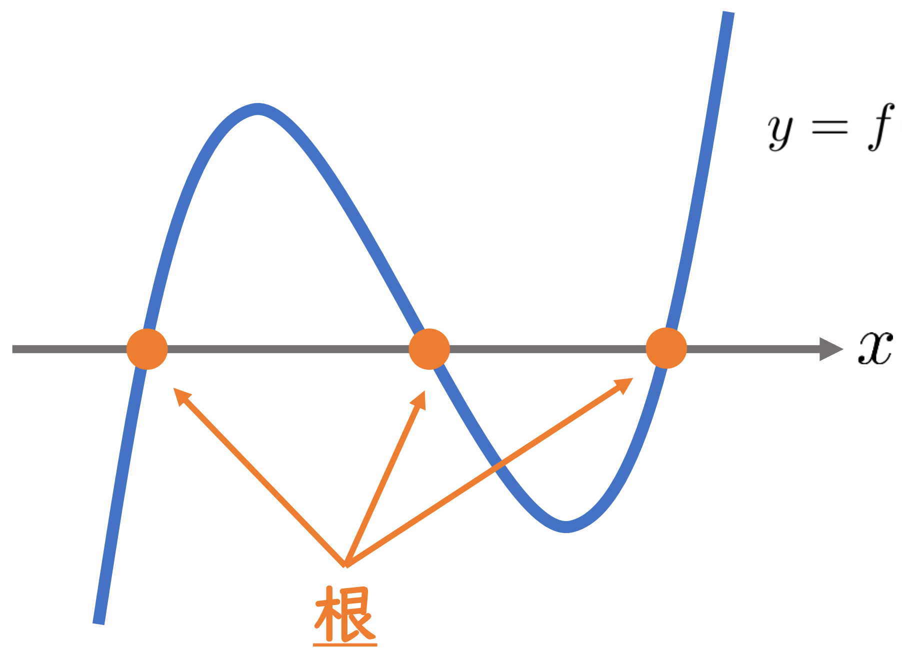
GitHub上のノートブックのurlを打ち込むと、直接取り込めます。

https://github.com/nogaki/Computational_Physics_B/tree/main/week14/week14.ipynb

[注意!]この状態では、GitHub上のファイルを開いただけで、
個人のドライブに保存されていません!
[ファイル]→[ドライブにコピーを保存]を実行すること。

根の探索

方程式 $f(x) = 0$ の根 x を計算機で求めたい

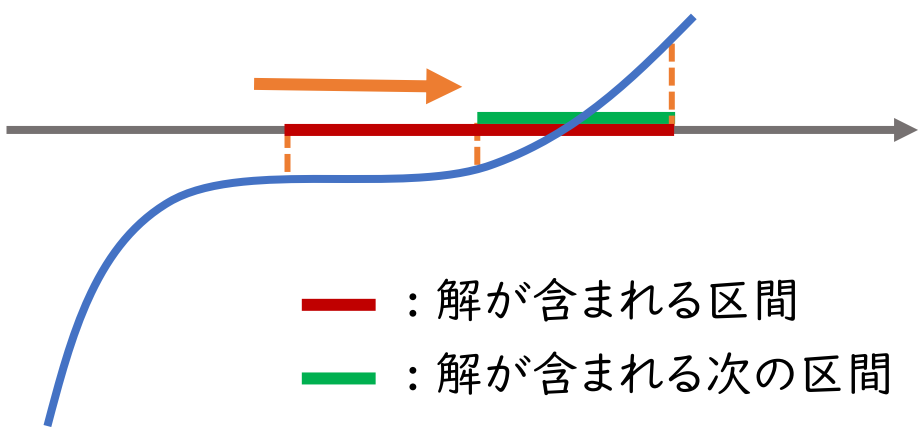


二分法

$f(x)$ を単調増加(減少)関数とする。

解が含まれる区間を半分に縮小していき、解を特定していく方法。

利点:必ず収束する　欠点:収束が遅い



二分法

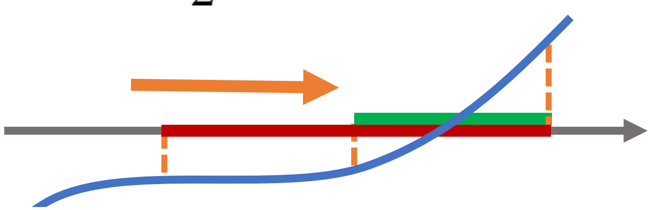
$f(x)$ を単調増加関数とする。

① $f(x_{\min}) < 0, \quad f(x_{\max}) > 0$ となるように $x_{\min}$, $x_{\max}$ を設定。

② $f\left(\dfrac{x_{\min}+x_{\max}}{2}\right) > 0$ なら、$x'_{\min} = x_{\min}$, $x'_{\max} = \dfrac{x_{\min}+x_{\max}}{2}$

$f\left(\dfrac{x_{\min}+x_{\max}}{2}\right) < 0$ なら、$x'_{\min} = \dfrac{x_{\min}+x_{\max}}{2}, x'_{\max} = x_{\max}$

と更新

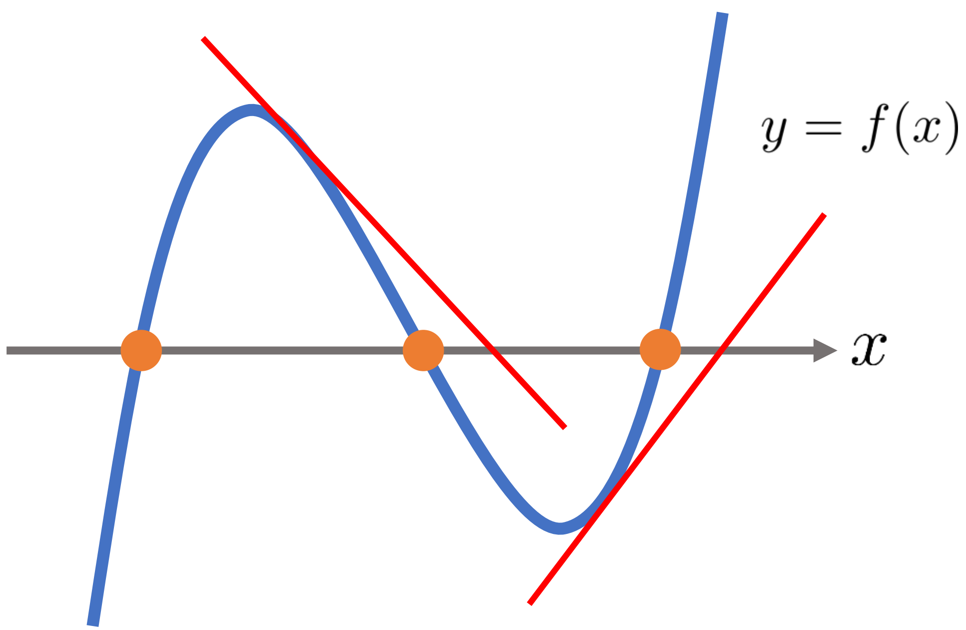


③ $x_{\min} \sim x_{\max}$ となるまで②を繰り返す

Newton法

関数の勾配の情報を用いることで、
二分法の収束の遅さを改善

利点：収束が早い　欠点：収束しないことがある。
勾配の情報が必要



Newton法

代数的視点

- 初期値 x_i に対して $f(x)$ をテイラー展開する

$$f(x) = f(x_i) + f'(x_i)(x - x_i) + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_i)}{n!}(x - x_i)^n$$

- 次のステップの値を $x_{i+1} = x_i - \dfrac{f(x_i)}{f'(x_i)}$

  として、更新する $f(x_{i+1}) = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_i)}{n!}(x_{i+1} - x_i)^n$

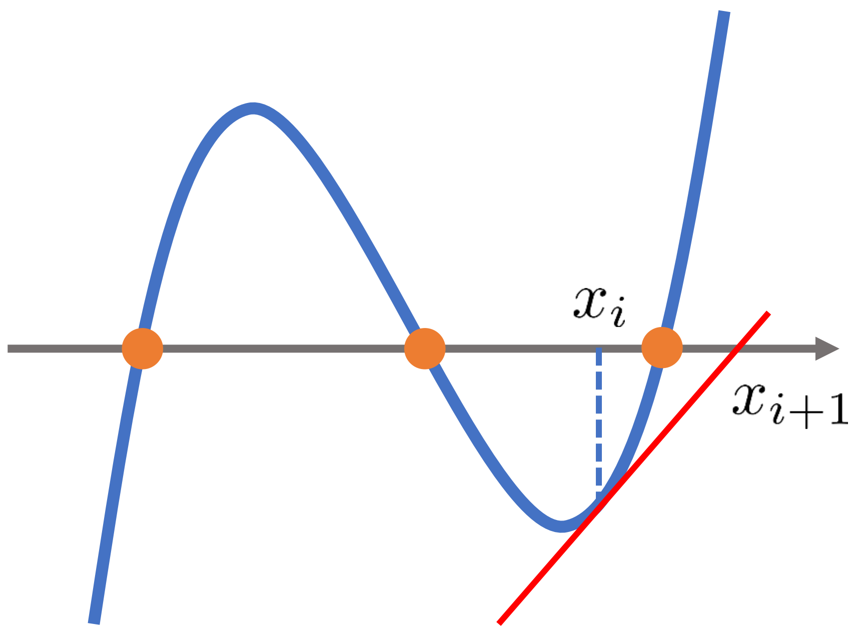
- 収束するまで繰り返す

Newton法

幾何的視点

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$ という選び方は、

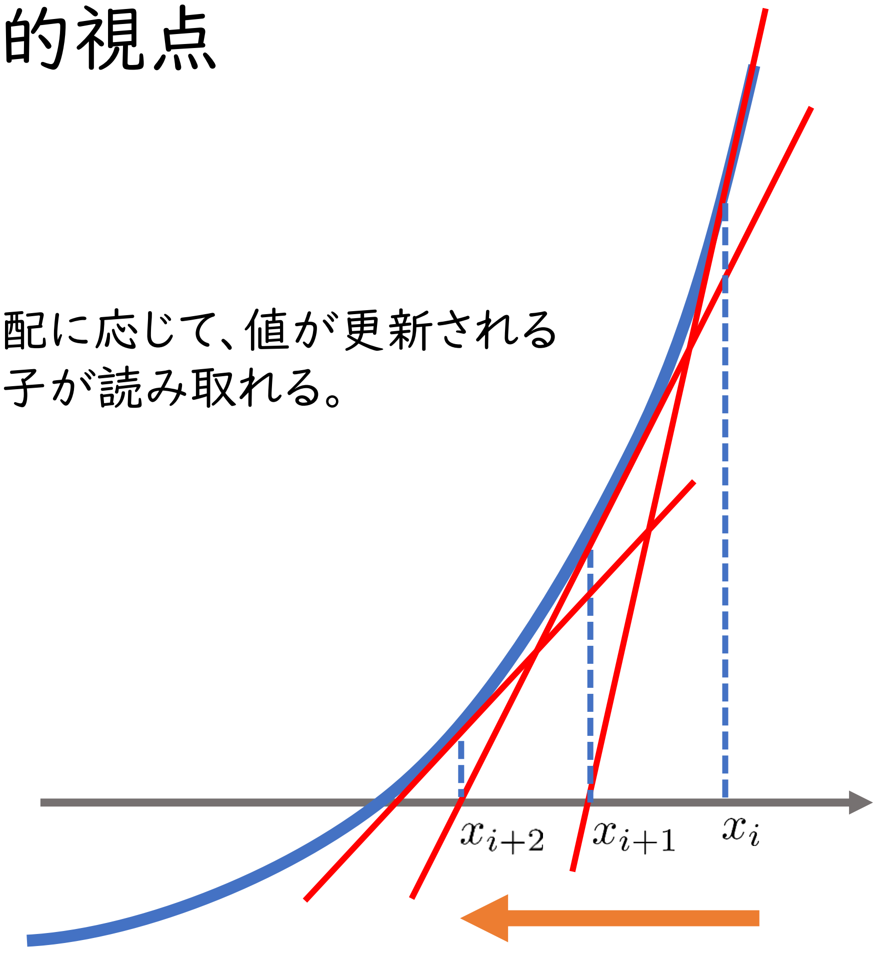
接線とx軸の交点を求めることに該当する。→演習



Newton法

幾何的視点

勾配に応じて、値が更新される
様子が読み取れる。



準Newton法

- 更新 $x_{i+1} = x_i - \dfrac{f(x_i)}{f'(x_i)}$ では、勾配の情報が必要とされるが、$f(x)$ が解析的に求まらない場合など、勾配を得るのが難しい場合がある。

- $f'(x_i) \sim \dfrac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}}$ として、勾配の代わりに差分を用いる。

$$x_{i+1} = x_i - f(x_i)\frac{x_i - x_{i-1}}{f(x_i) - f(x_{i-1})}$$

固定点問題

- 自己無撞着方程式 $g(x) = x$

  の解を求めたい。

  $x_{i+1} = g(x_i)$ のように逐次的に更新していく。

- 収束しない場合は、以下のように前のステップの解を混ぜるとよい。(収束は遅くなる)

$$x_{i+1} = rg(x_i) + (1-r)x_i$$

実習タイム

例題

- $f(x) = x^3 - x - 2 \qquad g(x) = \cos x - x$

  $h(x) = \log x + x - 3$ の根を二分法を用いて求めよ

- $f(x),\ g(x),\ h(x)$ の根をニュートン法、準ニュートン法

  を用いて求めよ。

- $g(x),\ h(x)$ を固定点問題に書き換えて、固定点問題として解け。