数値計算法 (9)

担当：櫻井 鉄也，今倉 暁，二村 保徳
TA　：加藤駿介

今日の講義内容

- 前回の発展：連立一次方程式の計算時間

- 今日の授業
  - 非線形方程式の解法，ニュートン法
    - 非線形方程式と反復法
    - ニュートン法
    - 近似解の挙動

- 演習課題に関する説明

発展：連立一次方程式の計算時間

- 連立一次方程式をMATLABで解いたときの時間を計測.

```
n = 1000; A = rand(n,n); b = ones(n,1);
tic; x = A\b; toc
```

- データ量は次元数の2乗，計算量は次元数の3乗に比例.

  - 次元が10倍で，
    データ量は100倍，計算量は1000倍

    - 1000次元のとき何秒かかるか？
    - 1万次元は解けるか？

発展：連立一次方程式の計算時間

- Mac Pro (Xeon E5 3.5GHz, メモリー64GB）の結果：

次元	時間	係数行列のサイズ
1,000	0.014 秒	(　8 MB)
2,000	0.09 秒	(　32 MB)
5,000	0.96 秒	(200 MB)
10,000	6.8 秒	(0.8 GB)
20,000	43.4 秒	(3.2 GB)
30,000	141.9 秒	(7.2 GB)
40,000	333.9 秒	(12.8 GB)
50,000	630.8 秒	(20.0 GB)
10,000,000	???	???

次元を増やしていったときの連立一次方程式求解の計算時間。

係数行列を保持するために必要なメモリは次元数nに対し、nの2乗 x 8 バイトになる（倍精度浮動小数の場合）

1000万次元のときは何バイトになるだろうか？

今日の授業

非線形方程式の解法

非線形方程式

- 線形の例

  フックの法則　$F = -kx$

  力を2倍にするとバネの伸びも2倍になる.
  あまり強く引っ張ると加える力と伸びが比例しなくなる.

- 非線形

  関数 $f(z)$ が2次以上の多項式，三角関数，指数関数などを含む

- z を2倍にしても $f(z)$ は2倍にはならない.

  一般に，非線形方程式 $f(z) = 0$ には解の公式（直接法）
  は存在しない.

- 反復法：繰り返し計算して，よりよい近似解を求める.

（再掲）連立一次方程式の数値解法

- 直接法と反復法
  - 直接法：有限回の演算で解を計算

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \longrightarrow \boldsymbol{x}$$

    - 係数行列の分解に基づく
  - 反復法：解に収束する近似解列を逐次的に生成

$$\boldsymbol{x}_0 \Rightarrow \boldsymbol{x}_1 \Rightarrow \boldsymbol{x}_2 \Rightarrow \cdots \Rightarrow \boldsymbol{x}_{k-1} \Rightarrow \boldsymbol{x}_k \approx \boldsymbol{x}$$

    - 定常反復法（Jacobi法など）
    - Krylov部分空間法（共役勾配法など）
    - その他

2分法

と

はさみうち法

2分法

- 非線形方程式 $f(z) = 0$ の解を求める最も単純な方法（最も確実な方法でもある）

- 区間 $[a^{(0)}, b^{(0)}]$ において関数 $f(z)$ が連続であるとし、

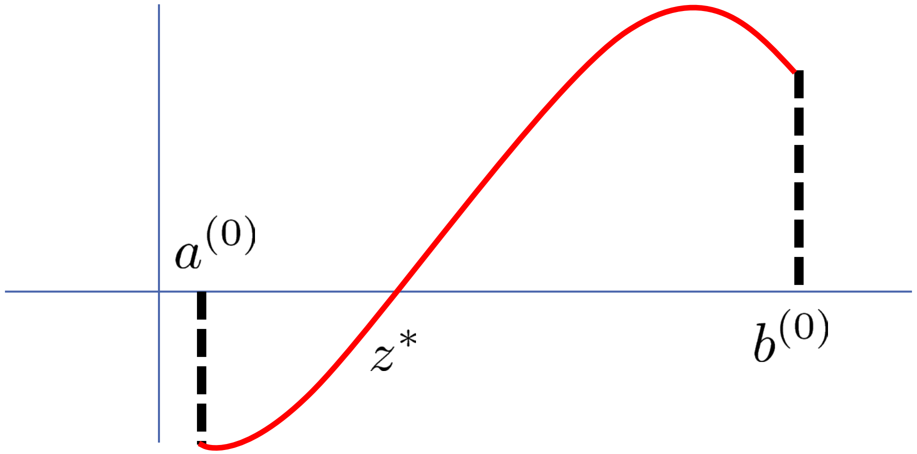
$$f(a^{(0)})f(b^{(0)}) < 0$$

符号が異なる

とする。この時、区間 $[a^{(0)}, b^{(0)}]$ に解が少なくとも1つ存在する。

f(a^(0))とf(b^(0))の符号が異なるときf(a^(0))f(b^(0)) < 0を満たす。

関数f(z)は連続なので、f(a^(0))とf(b^(0))の間のどこかで必ずゼロになる。



2分法

- 区間 $[a^{(0)}, b^{(0)}]$ の中点を $c^{(0)} = \frac{1}{2}(a^{(0)} + b^{(0)})$ と置く。この時、

$$f(a^{(0)})f(c^{(0)}) < 0 \quad \Leftrightarrow \quad z^* \in [a^{(0)}, c^{(0)}]$$

$$f(c^{(0)})f(b^{(0)}) < 0 \quad \Leftrightarrow \quad z^* \in [c^{(0)}, b^{(0)}]$$

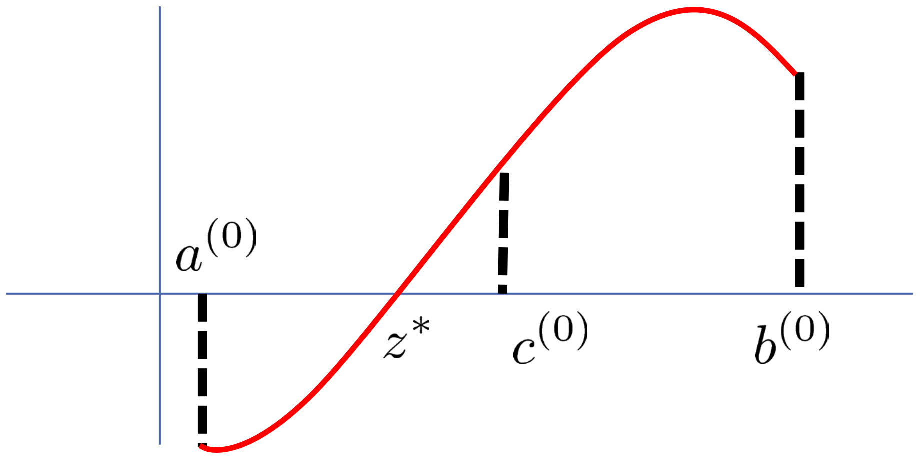
  のどちらかが成り立つ。

- 区間を $[a^{(0)}, c^{(0)}]$ または $[c^{(0)}, b^{(0)}]$ に更新し、区間が十分小さくなるまで反復する

区間を半分に分割して、それぞれの区間の両端で符号が変わっているかチェックする。

符号が変わっている方の区間に対して同じことを繰り返す。

この反復計算によって解を1つ求めることができる。



はさみうち法

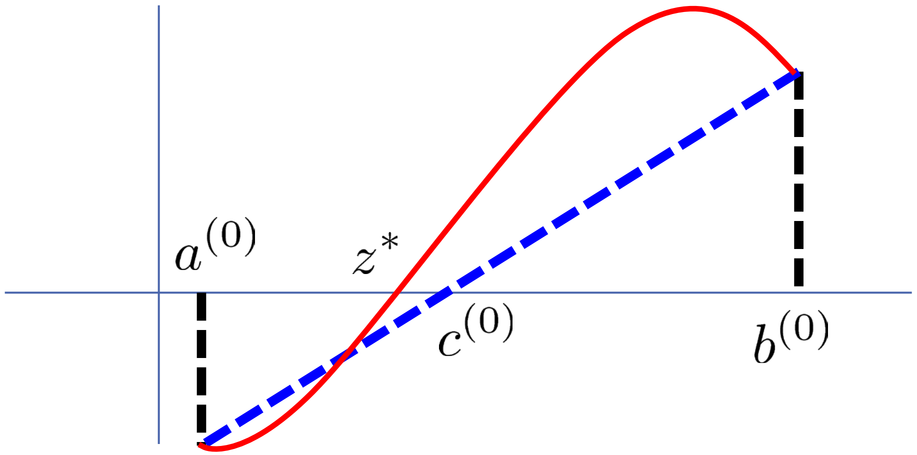
- 2点 $(a^{(0)}, f(a^{(0)}))$ および $(b^{(0)}, f(b^{(0)}))$ を通る直線がx軸と交わる点を $c^{(0)}$ と置く。この時、

$$f(a^{(0)})f(c^{(0)}) < 0 \quad \Leftrightarrow \quad z^* \in [a^{(0)}, c^{(0)}]$$

$$f(c^{(0)})f(b^{(0)}) < 0 \quad \Leftrightarrow \quad z^* \in [c^{(0)}, b^{(0)}]$$

  のどちらかが成り立つ。
- 区間を $[a^{(0)}, c^{(0)}]$ または $[c^{(0)}, b^{(0)}]$ に更新し、区間が十分小さくなるまで反復する

2分法は中点で区間を分割するが、これに対してはさみうち法では説明にある直線がx軸と交わる点で区間を分割する。



ニュートン法

ニュートン法の反復

- 反復による $f(z)=0$ の解法：

1) 適当な近似解 $z^{(0)}$ を与える.

2) $z^{(0)}$ において $f(z)$ の近似式 $g(z)$ を求める.

3) $g(z)=0$ となる z を求めて，これを $z^{(1)}$ とする.

$z^{(1)}$ に対して同様に 2), 3) の計算を行い $z^{(2)}$ を得る.

これを繰り返すことで近似解の列

$$z^{(0)} \to z^{(1)} \to z^{(2)} \dots$$

を得る.

f(z)の近似として何らかの(扱いやすい)関数g(z)を用いて計算を進める反復解法の枠組み。

g(z) = 0を満たすzを求める計算を繰り返す。
※反復毎にg(z)は異なる。

ここから説明するニュートン法はこの枠組みの中に入る。

ニュートン法

- $f(z)$ を近似　$z^{(k)}$ のまわりでテイラー展開：

$$f(z) = f(z^{(k)}) + f'(z^{(k)})(z - z^{(k)}) + \cdots$$

- 1次までで打ち切り $g(z)$ とおく：

$$g(z) = f(z^{(k)}) + f'(z^{(k)})(z - z^{(k)})$$

- $g(z) = 0$ となる z を次の近似解 $z^{(k+1)}$ とする.

- 反復の式は

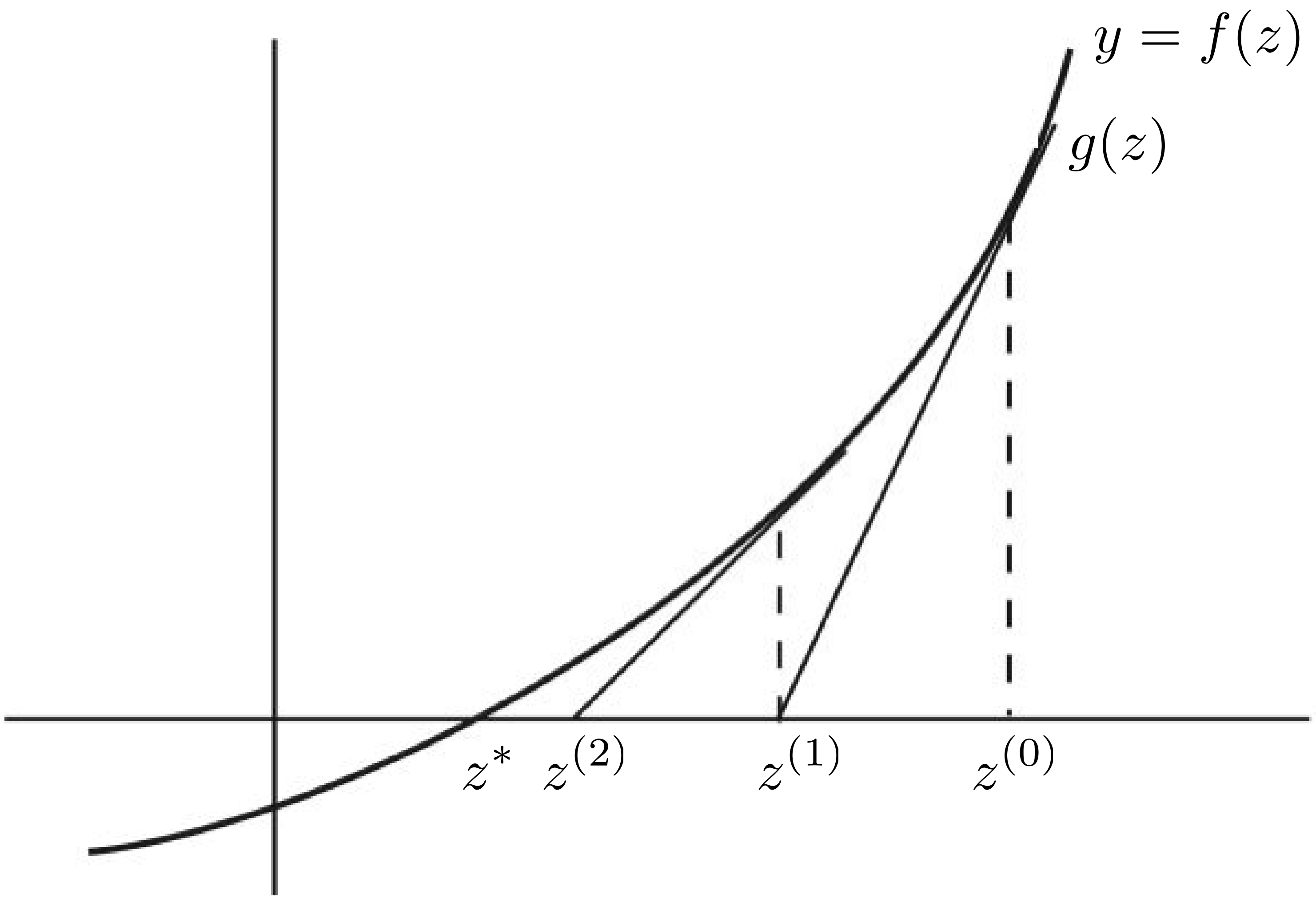
$$z^{(k+1)} = z^{(k)} - \frac{f(z^{(k)})}{f'(z^{(k)})}, \quad k = 0, 1, \ldots$$

ニュートン法では、
z^(k)まわりのテイラー展開を1次までの項で打ち切った関数をg(z)として使う。

g(z)は1次式なのでg(z)=0を満たすzは簡単に計算できる。
その計算式が反復の式になる。

ニュートン法

- 近似解での接線になっている.



k反復目のg(z)はz^(k)での接線になっている。

この図はニュートン法の解探索の様子として見ることもできる。

反復の停止

- 適当なところで反復を止める必要がある.
  - 求めたいのは $f(z) = 0$ となる点.
  - 計算誤差のため正確に $f(z) = 0$ とならない.

  ⇓

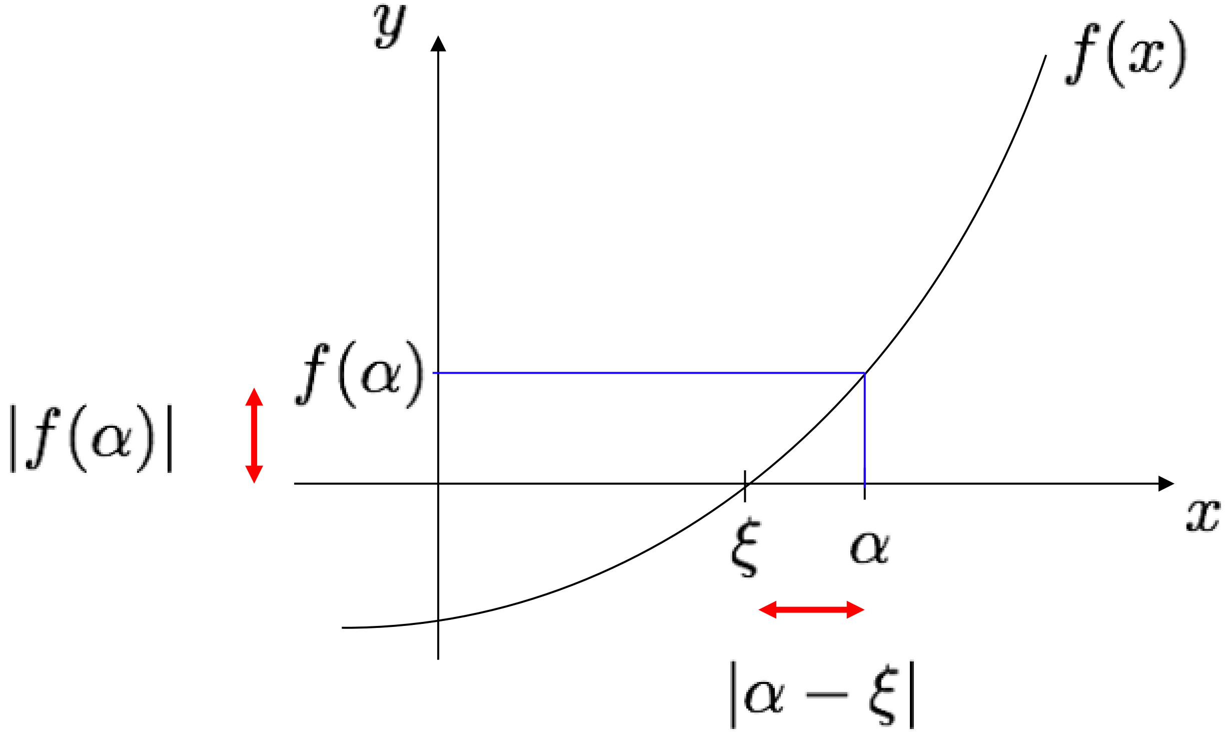
  - 残差 $|f(z)|$ が小さくなったときに反復を停止する.

（復習）誤差と残差

- 残差

方程式 $f(x) = 0$ の解 ξ , 近似解 α

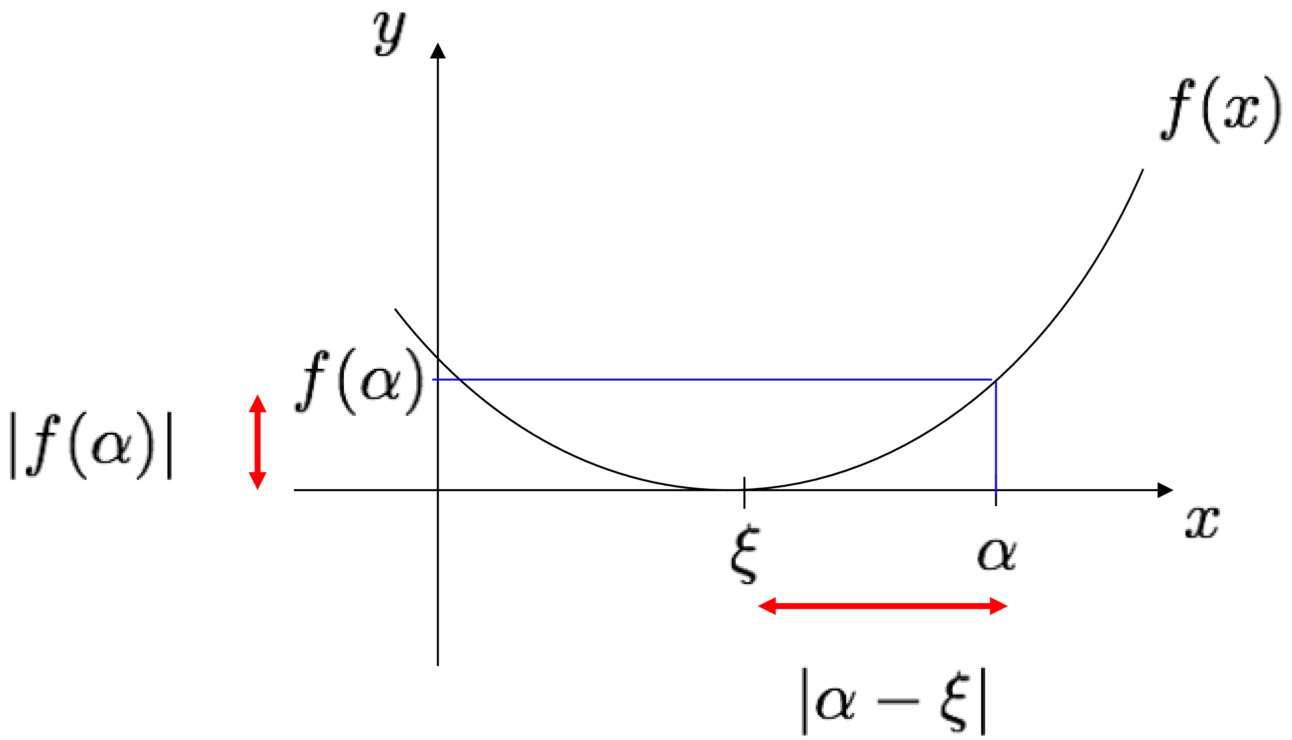
残差 $|f(\alpha)|$



（復習）誤差と残差

- 関数の形状に依存する

  残差は同じ大きさだが，誤差は大きくなっている．



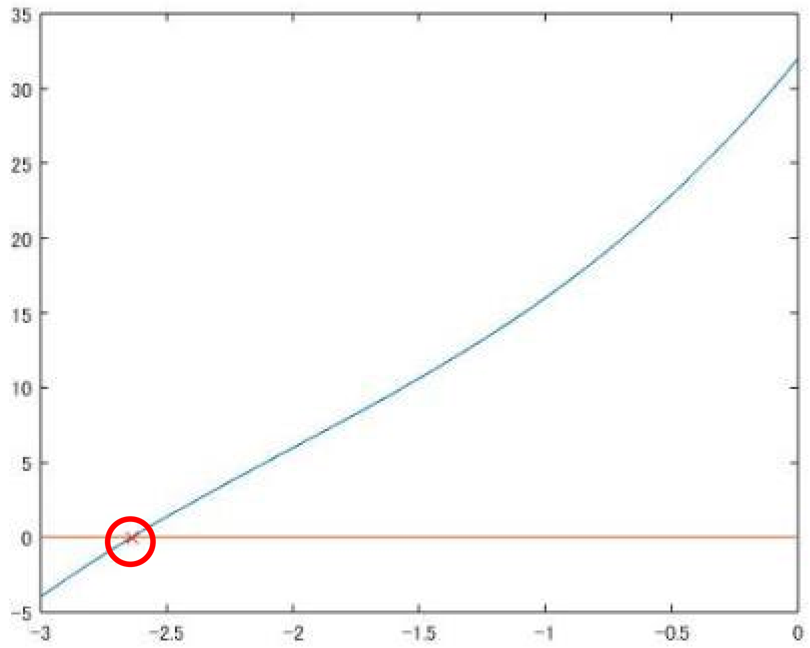
近似解の挙動

- 近似解はどのように解に近づいていくか.
  - 反復ごとに残差 $|f(z)|$ の値を出力して確認する.
  - 近似解が解から離れているとき，残差は1回の反復でどう変化するか.
  - 近似解が解にある程度近い (たとえば残差が $10^{-2} \sim 10^{-5}$ のとき) の1回反復後の残差はどうなるか.

近似解の挙動

- 2分法・はさみうち法・ニュートン法の収束性の比較
  - 例題

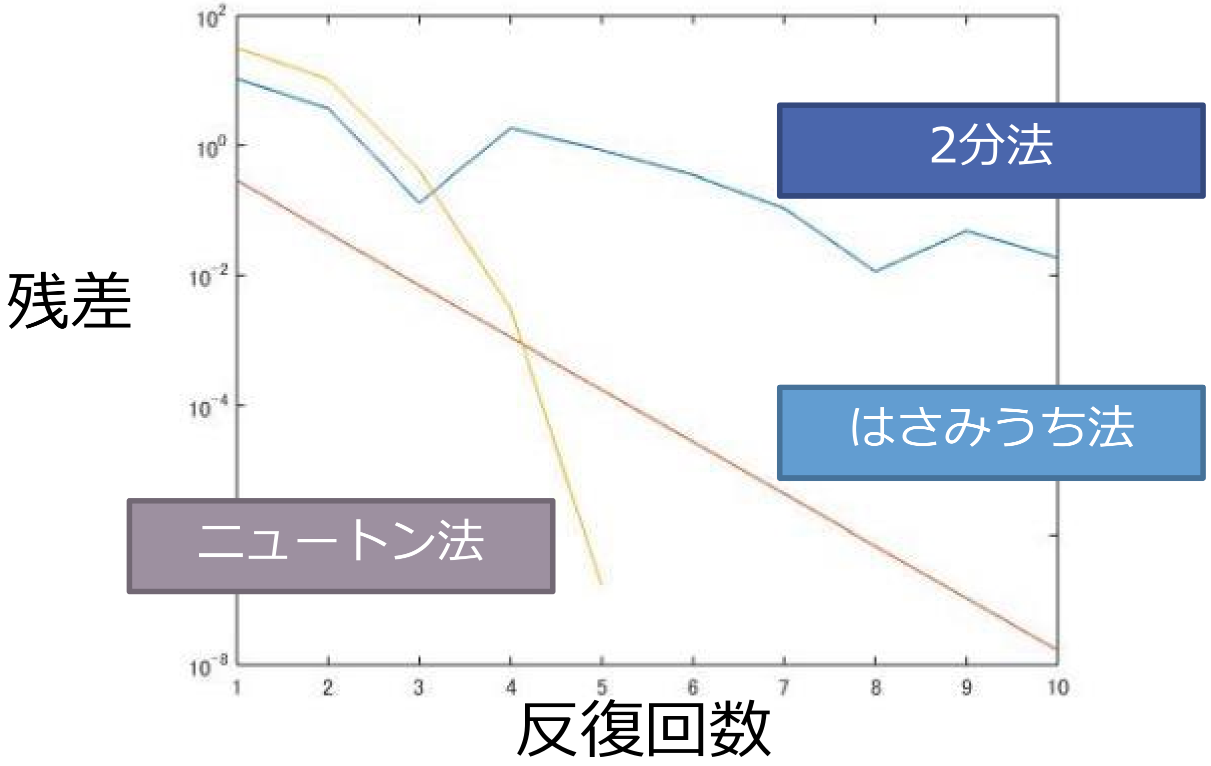
$$f(z) = z^3 + 6z^2 + 21z + 32 = 0$$



近似解の挙動

- 2分法・はさみうち法・ニュートン法の収束性の比較
  - 例題

$$f(z) = z^3 + 6z^2 + 21z + 32 = 0$$



この例では残差10^{-4}以下を目指すとニュートン法が最も反復回数が少ない。

ニュートン法の近似解の挙動

- 順調に解に近づいているときの挙動：

  - 近似解が解から離れているときには,
    1回の反復で残差は 1桁程度ずつ小さくなる.

  - 近似解が解に近いときには,
    1回の反復で残差は 2乗で小さくなる.

ニュートン法では、近似解が(真の)解の近くにあるとき、反復を進めると急速に解に近づいていく。

ニュートン法の近似解の挙動

- ニュートン法はテイラー展開の1次までの項を使っている.
  - 近似解の近くに $f(z) = 0$ となる点が1つだけあると仮定している.
  - 近くに $f(z) = 0$ となる点(方程式の解)が2つ以上あるとどうなるか?

ニュートン法の近似解の挙動

- ニュートン法は近似解が必ずしも最寄りの解に収束していくとは限らない．
  - 複素平面上で初期値の位置を変えながらニュートン法を適用．
  - どの解に近づいたかによって，初期値の位置 (x_0, y_0) に色を変えた点を表示することで，初期値依存性が確認できる．

（発展）ニュートン法の収束性改善

- $f(z)$ を近似 $z^{(k)}$ のまわりでテイラー展開：

$$f(z) = f(z^{(k)}) + f'(z^{(k)})(z - z^{(k)}) + \cdots$$

- 1次までで打ち切り $g(z)$ とおく：

$$g(z) = f(z^{(k)}) + f'(z^{(k)})(z - z^{(k)})$$

テイラー展開の2次まで使えば近似精度が改善
→収束性が改善
（ハウスホルダー法、ハレー法）

収束性はニュートン法より早い。
ただし高階微分が必要なため、
収束までの計算時間が早いとは限らない