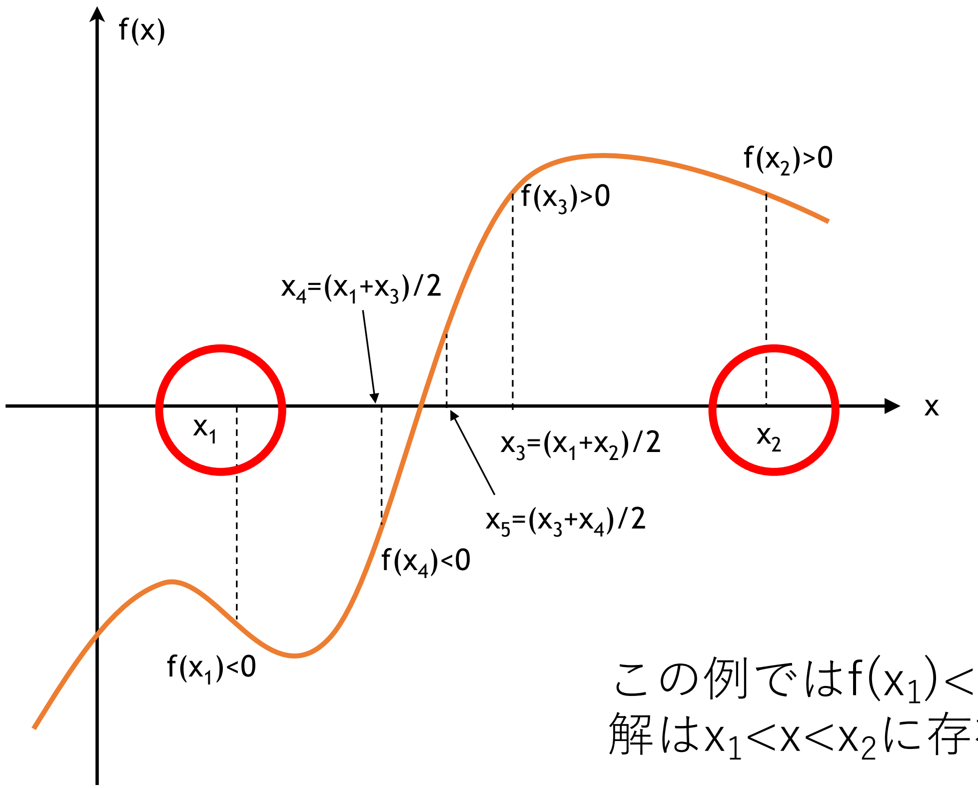
計算物理学II (第9回)

今回の内容

- 非線形方程式の解法
  - 二分法
  - はさみうち法・割線法
  - Newton法
  - Broyden法

二分法

- xが1次元の場合に$f(x)=0$の解を求める
- $y=f(x)$のグラフを書いて解がどのあたりにあるかを調べる
- 二分法：解の存在する範囲を見つけ、その範囲を反復法で狭めることで近似解を得る
- 二点$x_1,x_2(x_1<x_2)$で$f(x)$の符号が異なる場合、$x_1<x<x_2$に解がある($f(x)$が連続の場合)

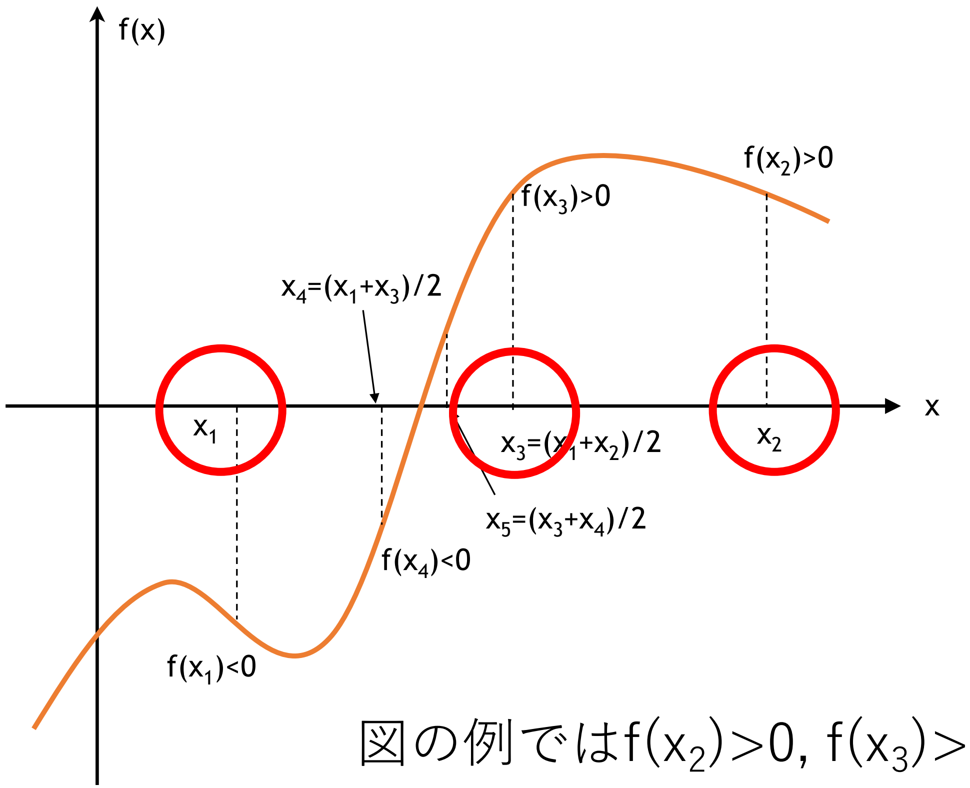


この例では$f(x_1)<0$と$f(x_2)<0$であるため、解は$x_1<x<x_2$に存在する

二分法

x_1とx_2の中点(x_3)でのf(x)の符号を調べる

- $f(x_1)$と$f(x_3)$の符号が同じ場合→解は $x_3<x<x_2$に存在
- $f(x_2)$と$f(x_3)$の符号が同じ場合→解は$x_1<x<x_3$に存在

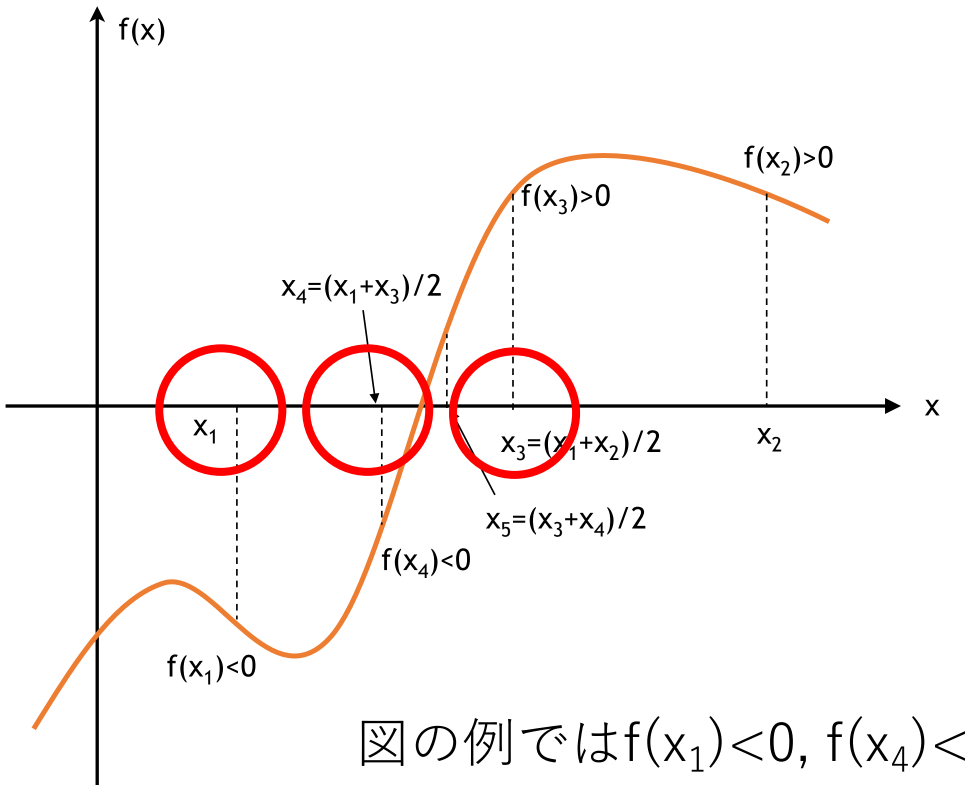


図の例では$f(x_2)>0$, $f(x_3)>0$なので解は $x_1 < x < x_3$に存在

二分法

これを繰り返す。x_1とx_3の中点(x_4)での$f(x)$の符号を調べる

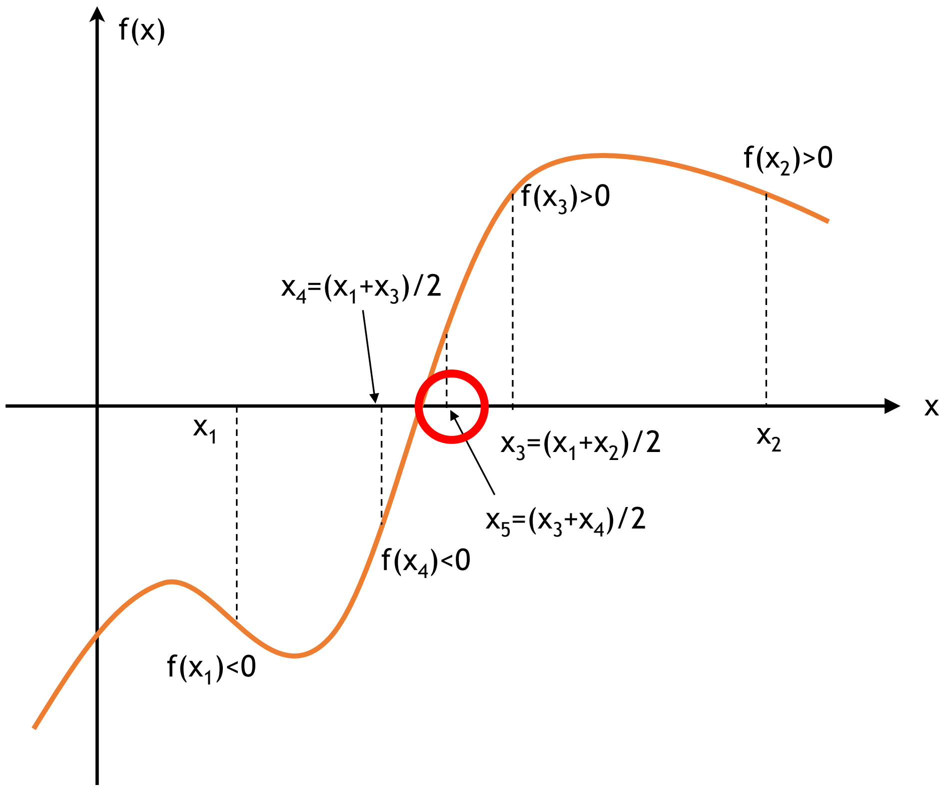
- $f(x_1)$と$f(x_4)$の符号が同じ場合→解は $x_4<x<x_3$に存在
- $f(x_3)$と$f(x_4)$の符号が同じ場合→解は$x_1<x<x_4$に存在



図の例では$f(x_1)<0$, $f(x_4)<0$なので解は $x_4 < x < x_3$に存在

二分法

- 続けてx_4とx_3の中点(x_5)でのf(x)の符号を調べる
- 一度反復すると解の存在領域は前回の1/2となるため、k回繰り返すと解の精度は $(x_2-x_1)/2^k$ となる
- 十分に解の存在領域が小さくなったところで計算を打ち切れば近似解となる
- 時間はかかるが確実に収束する



はさみうち法

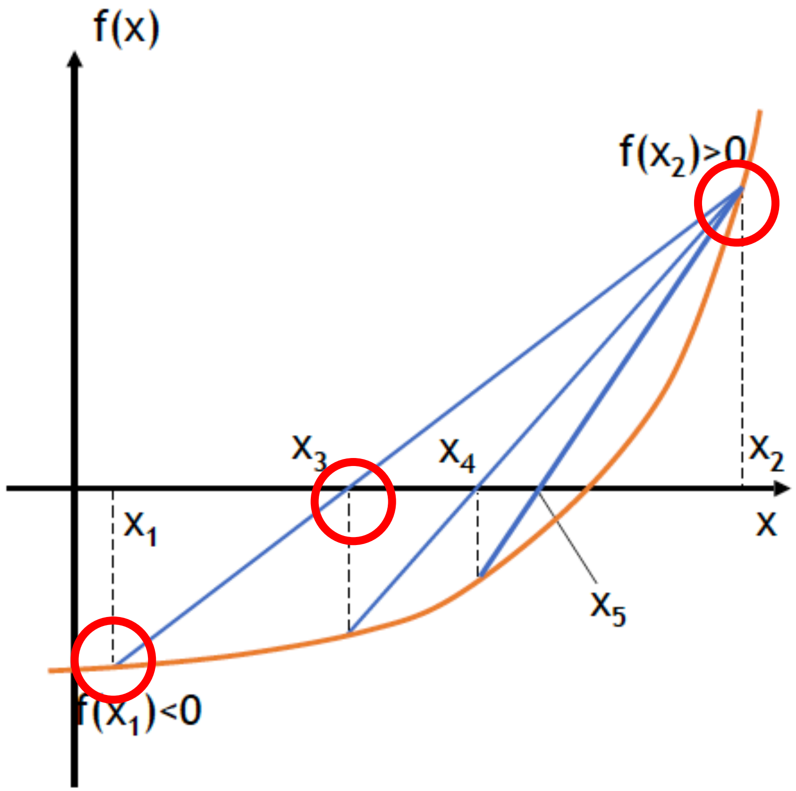
- 二分法ではx1, x2の中点x3を用いて解の存在領域を狭めた
- 中点である必要はなく[x1,x2]内の任意の点でもOK

はさみうち法： $(x_1,f(x_1))$, $(x_2,f(x_2))$を通る直線とx軸との交点をx_3とする

$$y = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}(x - x_2) + f(x_2)$$

$$x_3 = x_2 - \frac{x_2 - x_1}{f(x_2) - f(x_1)} f(x_2)$$

f(x3)の符号を調べて二分法のときと同じように解の存在領域を狭める

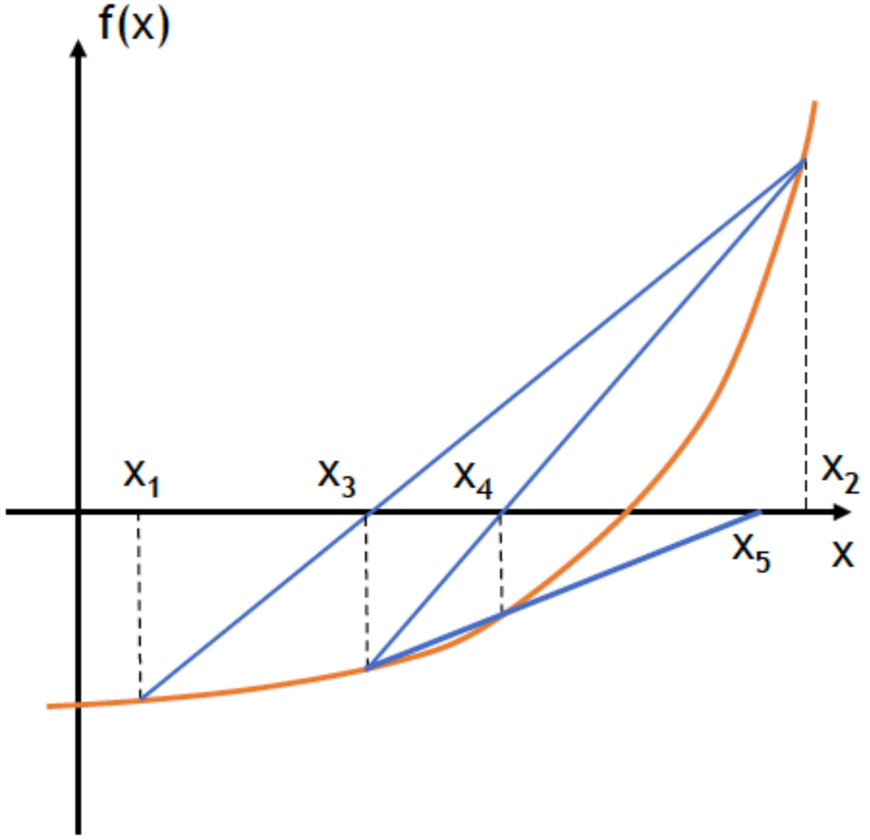


割線(かっせん)法(セカント法)

- はさみうち法では交点x_3を求めた後$f(x_3)$の符号によってx_1, x_2のどちらかをx_3と置き換える
- 割線法では符号を調べず必ず最新の2点を使って直線を引く
- x_3: $(x_1,f(x_1))$と$(x_2,f(x_2))$を通る直線とx軸との交点
- x_4: $(x_2,f(x_2))$と$(x_3,f(x_3))$を通る直線とx軸との交点
- x_5: $(x_3,f(x_3))$と$(x_4,f(x_4))$を通る直線とx軸との交点

  ・・・・
- x_{n+1}: $(x_{n-1}, f(x_{n-1})$と$(x_n,f(x_n))$を通る直線とx軸との交点

- 二分法・はさみうち法より早く収束するが
  解の存在領域を見ていないため収束しないことも
  (直線がx軸とほぼ平行になってしまった場合など)
- うまく行かない時は二分法に戻してやり直す



図の場合、挟み撃ち法だとx_5はx_4とx_2から決めるが
割線法ではx_3とx_4から決める

Newton法

$f(x_n)$での接線とx軸との交点をx_{n+1}とする。これを繰り返す

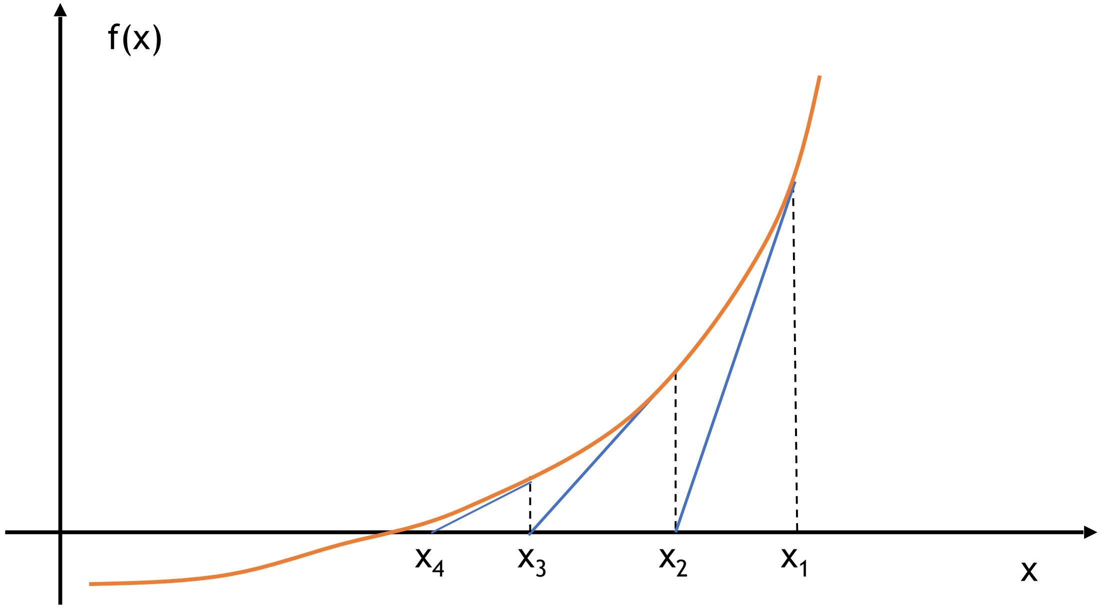
x_nでの$f(x)$の接線 $$y = f'(x_n)(x - x_n) + f(x_n)$$

接線でのx軸との交点は
$y=0$として $$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

$f'(x_n)$が解析的にわからない場合は数値微分で計算する。
$f'(x_n)$を正確に求めるのが目的ではないので $[f(x_n+h)-f(x_n)]/h$でもよい

Newton法は収束が非常に早いが
微係数がゼロに近くなり、接線がx軸と平行に近いと
x_{n+1}がx_nから離れた場所に飛んでしまう。

計算を始めるx_1の選び方が重要
階段関数などでは使えない(二分法を使う)



多次元のNewton法

多変数の場合

$$
\begin{aligned}
f_1(x_1, x_2, \cdots, x_n) &= 0,\\
f_2(x_1, x_2, \cdots, x_n) &= 0,\\
&\vdots\\
f_n(x_1, x_2, \cdots, x_n) &= 0
\end{aligned}
\quad\Longleftrightarrow\quad \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}
$$

二分法・はさみうち法は使えない (1次元の場合は解を含む領域が設定できるが多次元の場合は？)
解をはさまないタイプの方法は使える。Newton法を多次元に拡張

k回目の近似解を$\mathbf{x}^{(k)}$とする。$\mathbf{f}(\mathbf{x})$を$\mathbf{x}^{(k)}$周りで1次までTaylor展開すると

$$f_i(\boldsymbol{x}^{(k)} + \Delta\boldsymbol{x}^{(k)}) = f_i(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial f_i(\boldsymbol{x}^{(k)})}{\partial x_j} \Delta x_j^{(k)} + \mathcal{O}((\Delta\boldsymbol{x}^{(k)})^2)$$

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(k)} + \Delta\boldsymbol{x}^{(k)}) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(k)}) + J(\boldsymbol{x}^{(k)}) \cdot \Delta\boldsymbol{x}^{(k)} + \mathcal{O}((\Delta\boldsymbol{x}^{(k)})^2)$$

ヤコビアン (行列)

$$J_{ij}(\boldsymbol{x}^{(k)}) = \frac{\partial f_i(\boldsymbol{x}^{(k)})}{\partial x_j}$$

$\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(k+1)})=\mathbf{0}$となるように$\Delta\mathbf{x}^{(k)}$と$\mathbf{x}^{(k+1)}$を決めると

$$\Delta\boldsymbol{x}^{(k)} = -J^{-1}(\boldsymbol{x}^{(k)}) \cdot \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(k)})$$

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \Delta\boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}^{(k)} - \boxed{J^{-1}(\boldsymbol{x}^{(k)})}\, \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(k)})$$

逆行列の計算が必要

Broyden法

多次元Newton法ではヤコビアンの計算と逆行列の計算が必要。ヤコビアンを割線法の方法で簡略化する

Newton法でヤコビアン$J^{(k)}$を他の行列で置き換える

$$B^{(k)} \cdot \boldsymbol{\Delta x}^{(k)} = -\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(k)})$$

$$\boldsymbol{\Delta x}^{(k)} = \boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}$$

1次元の割線法ではこの行列Bは直近の2点の傾きから求める。これを多次元に拡張

$$B^{(k+1)} \cdot \boldsymbol{\Delta x}^{(k)} = \boldsymbol{\Delta f}^{(k)} \qquad \boldsymbol{\Delta f}^{(k)} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) - \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(k)})$$

$$B^{(k+1)} = B^{(k)} + \frac{(\boldsymbol{\Delta f}^{(k)} - B^{(k)} \cdot \boldsymbol{\Delta x}^{(k)}) \otimes \boldsymbol{\Delta x}^{(k)}}{\boldsymbol{\Delta x}^{(k)} \cdot \boldsymbol{\Delta x}^{(k)}}$$

はこの式を満たす(代入して確認してみよう)

Broyden法に必要なのは$B^{(k+1)}$の逆行列。これは

$$[B^{(k+1)}]^{-1} = [B^{(k)}]^{-1} + \frac{\{\boldsymbol{\Delta x}^{(k)} - [B^{(k)}]^{-1} \cdot \boldsymbol{\Delta f}^{(k)}\} \otimes \boldsymbol{\Delta x}^{(k)} \cdot [B^{(k)}]^{-1}}{\boldsymbol{\Delta x}^{(k)} \cdot [B^{(k)}]^{-1} \cdot \boldsymbol{\Delta f}^{(k)}}$$

で与えられる($[B^{(k+1)}]^{-1}$・$B^{(k+1)}$を計算して確認できる)