数理逍遥II[16C1115] Topics in Mathematics
Fall 2016　(後期)
（数値）計算数理科学入門
Introduction to (numerical) computational mathematics

１０月６日　あらすじ

Xavier DAHAN
Ochanomizu Graduate Leading Promotion Center
Office:理学部2号館503 mail: dahan.xavier@ocha.ac.jp

モチベーション Motivation

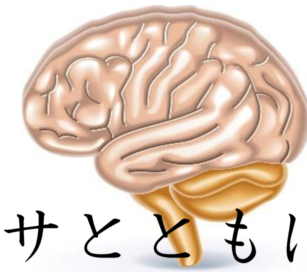
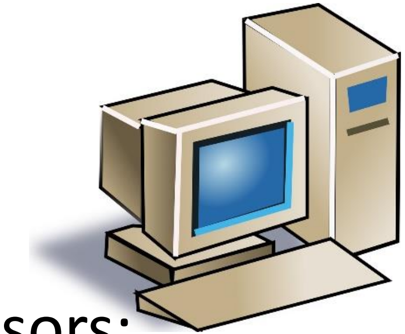
- モデル理論。シミュレーション。
  Modelization, Simulation.
- 物理学、力学、天文学などにおける現象を、常微分方程式、偏微分方程式をはじめ、関数などで記述する事実である。In Physics, Mechanics, Astronomy, many phenomenon can be described by equations, mainly ordinary or partial differential equations.
- 関数の零点をどうやって求められるか？
  How to find the solution (zero) of a function?
- 関数をどうやって近時でくるか？（補間、近似)
  How to approximate a function?

モチベーション Motivation 2

- 偏/常微分方程式の数値解放を実行する際に、パラメーターや方程式が多く、あるいは精度が高い場合に、膨大な行列を扱うことになる。
  When solving numerically a partial or ordinary differential equation, if there are a lot of parameters or equations, and/or if high precision is required, then it is necessary to manipulate huge matrices.

- Typical size: dimension 100,000 （10万次元）
- 固有値、逆行列を求めるには簡単な方法が効率ではなくこうした膨大な行列を扱うことができない。
- より高率的な方法が必要である
  necessary to have more efficient method.

計算数学って、何か？

- 人間の脳と計算機のプロセッサともに
  Both for Human brain and Computer's processors:
  - 足し算, 掛け算 Addition, Multiplication
  - 割り算: 足し/掛け算に基づく。 Based on + and x.

- この算数に基づいて Based on this arithmetic
  - 関数の零点をどう求めるか？
    How to find the zeros of functions ?
  - sin, cos, $\sqrt[13]{\quad}$, などの値をどう求めるか。
    How to approximate functions like sin, cos, $\sqrt[13]{\quad}$?
    - ただ、多項式関数の場合に問題がない。
      But there is no problem for polynomial functions.
    - 関数を多項式でどう近時するか。(補間など)
      How to approximate functions by polynomials ?

線形代数に関する計算

- 正方行列が大事な役割を果たしている。
  Square matrices play an important role.
  → 正方行列だけに集中する。
  Only focus on square matrices.

- 一次方連立程式を解く。 $A \cdot X = B$ (A可逆行列。Bベクトル。X未知)
  Solve a linear system.
  → (可逆)行列Aを逆転する

- 固有値や固有ベクトルを求めることも大事である。
  Computing the eigenvalues and eigenvectors is also very important.

目次　Contents

1. 関数の零点を求める　Find (real) zeros of functions.

2. 大事で特別な関数：一次変換（常に有限次元→行列)
   - 逆行列を逆にする Invert a matrix

3. 固有値（固有空間） Eigenvalues (and eigenspace)
   - 対称行列の場合 Case of symmetric matrices

4. 関数を近似する：
   - 多項式補間の概要.
   - 直交多項式（例：Chebyshev多項式)

接しない大事の基礎的なもの

- 数値積分: Numerical Integration
  ほとんどの普通の関数を、普通の関数を表現して積分できない→　積分の値を近似する
  Most usual functions cannot be integrated by using usual functions→ approximate value of the integral

- 常微分方程式の打ち切り(Eulerスキームなど)
  Discretization of Ordinary Differential Equations (ODE)

- フーリエ解析を用いて関数の近似(フーリエ展開)
  Approximation of functions by Fourier analysis (approximation through Fourier series)

この講義について About this class

- <u>**履修年次**</u>：2-3年　(1年の場合、以下の科目に関する知識をもてれば助かる
  - テーラー展開、普通の実変数実数値の解析
  - 多変数関数を微分できること、
  - 線系代数の基礎：固有値、固有空間　(定義以上必要ではない)、

新しい概念、理論を紹介するというよりも、「方法」とその解析(精度、効率性など）を教える。

- <u>**評価方法**</u>：小レポート(章が終わったら、練習問題を課する。ほぼ4回).

- <u>**言語**</u>：日本語・英語 (フランス語なし)

今日の講義:関数の零点を求める
Find (real) zeros of functions

- 一変数のNewton法。収束の速さ。初期値の選択。
  Newton's method in one variable. Rate of convergence. Choice of the initial value.

- ２変数２方程式の例を用いて多変数への一般化
  Generalization to functions in n variables $f: \Omega \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ through examples in 2 variables.

- Newton法を用いて陰関数定理における陰関数を近似する。
  Approximate the implicit functions in the implicit function theorem by the Newton method.

二分法の具体的な例

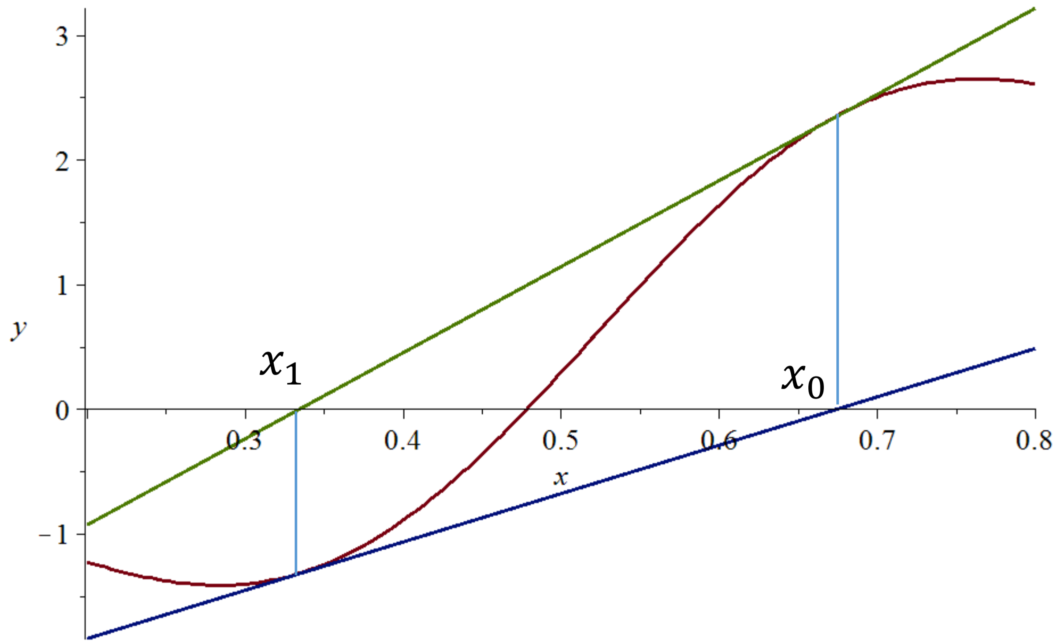
$$f(x) = x^3 + 4x^2 - 10$$

根の９桁までの近似値:1.365230013

2.1 The Bisection Method 51

n	a_n	b_n	p_n	$f(p_n)$
1	1.0	2.0	1.5	2.375
2	1.0	1.5	1.25	−1.79687
3	1.25	1.5	1.375	0.16211
4	1.25	1.375	1.3125	−0.84839
5	1.3125	1.375	1.34375	−0.35098
6	1.34375	1.375	1.359375	−0.09641
7	1.359375	1.375	1.3671875	0.03236
8	1.359375	1.3671875	1.36328125	−0.03215
9	1.36328125	1.3671875	1.365234375	0.000072
10	1.36328125	1.365234375	1.364257813	−0.01605
11	1.364257813	1.365234375	1.364746094	−0.00799
12	1.364746094	1.365234375	1.364990235	−0.00396
13	1.364990235	1.365234375	1.365112305	−0.00194

Newton法:Bad choice of initial value x_0

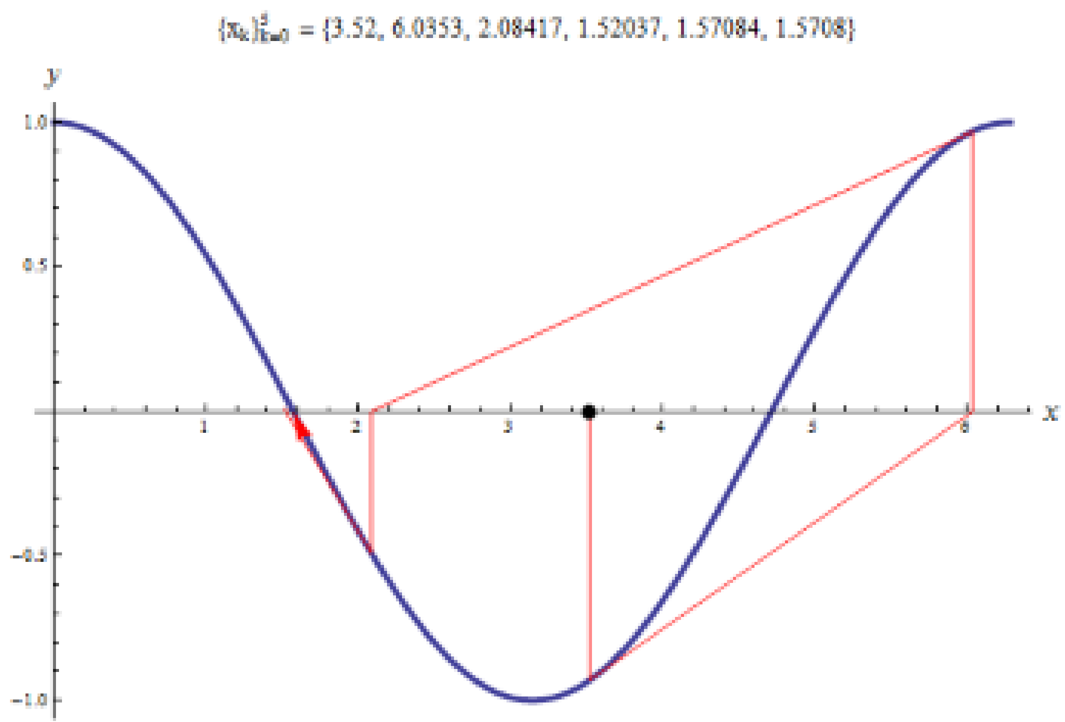


Here the method repeats infinitely:

$x_0 = x_2 = x_4 = \cdots \qquad x_1 = x_3 = x_5 \cdots$

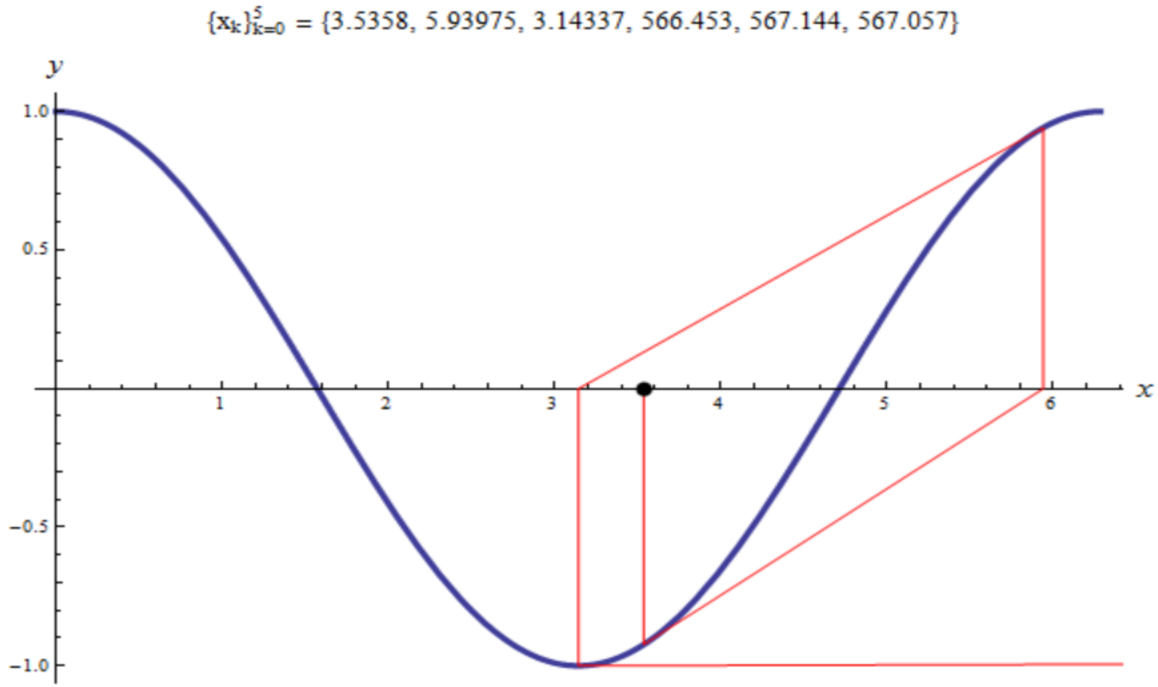
This almost never happens！（ほとんどあまり起こらない）

Newton法 : Bad choice of initial value x_0 (II)



The method finds a solution but not the one expected !
解法は解を見つけているが、期待された解がではない。

Newton法：Bad choice of initial value x_0 (III)



The method falls on a point x_i where $f'(x_i) = 0$. That doesn't work!
This problem almost never occurs.
この問題はほとんどあまり起こらない。

Newton法との割線法の比較

- $f(x) = \cos(x) - x$

- Newton 初期値：$x_0 = \frac{\pi}{4}$

$$x_{n+1} = x_n - \frac{\cos(x_n) - x_n}{-\sin(x_n) - 1}$$

- Secant 割線：
  初期値$x_0 = 0.5$, (第2) $x_1 = \frac{\pi}{4}$,

$$x_{n+1} = x_n - \frac{(x_m - x_{n-1})(\cos(x_n) - x_n)}{(\cos(x_n) - x_n) - (\cos(x_{n-1}) - x_{n-1})}$$

Table 2.5

Secant	
n	p_n
0	0.5
1	0.7853981635
2	0.7363841388
3	0.7390581392
4	0.7390851493
5	0.7390851332

Newton	
n	p_n
0	0.7853981635
1	0.7395361337
2	0.7390851781
3	0.7390851332
4	0.7390851332