関西すうがく徒のつどい
「 現代の数学と数値解析」

Tomoki UDA (@t_uda)

京都大学大学院理学研究科 数学・ 数理解析専攻 数理解析系

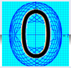
2012-09-08

Section 0

Introduction

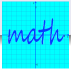
自己紹介

- 「 #0 は自然数」の人



- 一応、数学屋
- 専門は PDE の高精度/精度保証付き数値計算・ 数値解析

- 数学用語で捕捉リツイートするボット @math_tl を作って math！



概要

Abstract

この講義では、問題解決のための道具としての「現代の数学」を、数値解析という分野を通して紹介していくことを目的とする。テーマとしては「Newton 法」を取り上げる。実 1 変数の場合の Newton 法は、幾何的・直感的に理解し易く、グラフさえ描ければ中学生でもすぐ理解できる単純なアルゴリズムである。講義では、まず実 1 変数の場合の Newton 法の数値計算例をいくつか紹介しその性質を理解したのちに、複素平面における Newton 法、一般のノルム空間における Newton 法と、より一般化・抽象化したアルゴリズムについて学ぶ。

標語

- 「例示は理解の試金石」
- 「抽象化は数学最大の武器」

キーワード

- 数値計算
  - Newton(-Raphson) 法
  - 2 次収束
- 関数解析
  - ノルム空間
  - フレシェ微分
  - Newton 型作用素

記号の定義

実数全体	$\mathbf{R}$
複素数全体	$\mathbf{C}$
絶対値	$\lvert\cdot\rvert$
ノルム空間	X
ノルム	$\lVert\cdot\rVert$

Section 1

Numerical Computation

数値計算の歴史

突然ですが!
皆さんは「数値計算の歴史」はどれくらい長いと思いますか?

数値計算の歴史

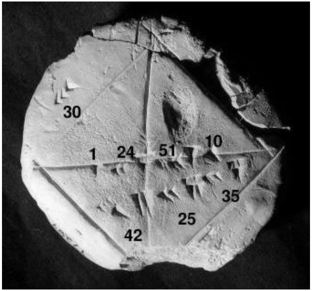
1. 1900 年代から
2. 江戸時代から
3. 西暦ぜろ年から
4. 紀元前 2000 年から
5. 「 数値計算」が何か分からない / その他

答え

- 紀元前 1800〜1600 年くらいから

バビロニアの粘土板 (YBC7289)

- 推定紀元前 1800〜1600 年前のもの
- $\sqrt{2}$ の近似値 がバビロニア数字で記されている
- "数値計算" が行われていたことを裏付けるもっとも古い記録の一つ



バビロニアの平方根

Method.

1. 求めたい数 $\sqrt{2}$ よりも大きい近似値を一つ選ぶ。例えば $x_0 = 1.5$ とする。
2. $(\sqrt{2})^2/x_0$ は $\sqrt{2}$ よりも小さい近似値になる。
3. 大きい近似値と小さい近似値の平均をとれば、より良い近似値が得られる。これを x_1 とする。
4. 実は新しい近似値 x_1 は $\sqrt{2}$ よりも必ず大きい。そこで、1 に戻り x_0 の代わりに x_1 を用いてこの計算を繰り返す。

数値計算とは

- 当然、当時まだ無理数の概念はない
- 一方、建築技術で「直角三角形の斜辺の長さ」が計算できることはとても重要 (近似値で十分!)
- 無理数の発見より遥か前から既に無理数の 近似値計算 は行われていた!

数値計算とは

数値計算 とは

- 得たい数の 近似値を計算する手法
- 厳密な数値は分からなくても 近似値 が分かればいい

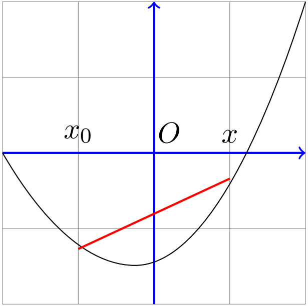
Section 2

Newton's Method (case $\mathbb{R}$)

実変数実数値関数の微分

Definition. 実関数の微分 (復習)

$$f'(x_0) = \lim_{x \to x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$$



実変数実数値関数の微分

Proposition. 同値な定義

以下は同値である:

- f が x_0 において微分可能で、微分係数 $f'(x_0) = a$
- $x \to x_0$ の時、 $f(x) = f(x_0) + a(x - x_0) + o(|x - x_0|)$

Remark. ランダウの o 記法

$o(h)$ は、 h が小さくなる $(h \to 0)$ に従って $o(h)$ も小さくなり無視できる ことを表している。
より正確には、

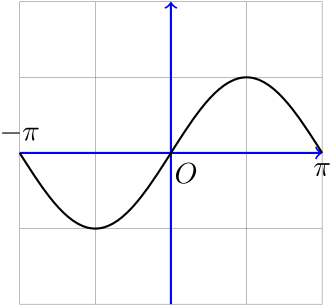
$$\lim_{h \to 0} \frac{o(h)}{h} = 0$$

根探索問題

根 (零点) 関数 f に対して、$f(a) = 0$ となる点 a のこと

根探索問題 "関数 f の根を見つけよ"

根探索問題



Example. 三角関数

- $f(x) = \sin x$ の時、$a = n\pi$ (n は整数)

Example. 多項式関数

- $f(x) = x^3 - x$ の時、$a = -1, 0, 1$
- $f(x) = x^2 + 1$ の時、f は根を持たない

根探索問題

根探索のモチベーション

- 要は "$f(x) = 0$" という形の "方程式を解け"
  - 多くの方程式は、"$f(x) = 0$" という形で書ける
  - しかし、二次方程式のように "解の公式" があって厳密に解を求められる場合は稀

Newton 法

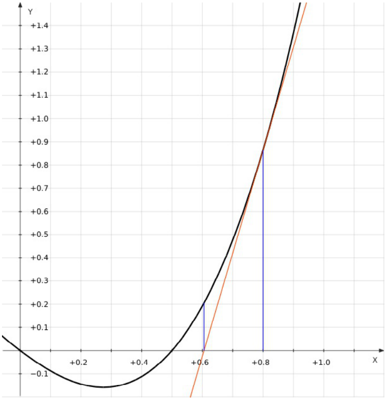
Newton(-Raphson) 法 とは

- 根探索問題の数値解法
- つまり、根の値を近似計算する手法の一つ

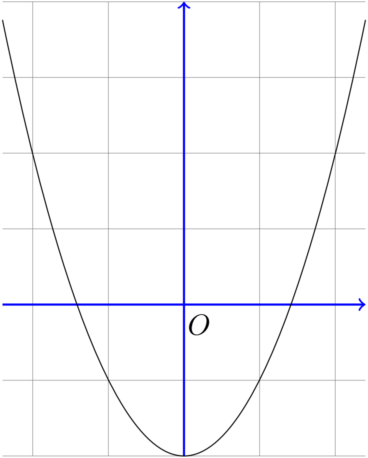
Newton 法

Method. 古典的 Newton 法

1. グラフ $y = f(x)$ を描く。
2. 初期値 x_0 を適当 (or テキトー) に選ぶ。
3. 点 $(x_0, f(x_0))$ から接線を引く。
4. 接線と x 軸の交点を x_1 として この操作を繰り返す。



Newton 法



Example. 放物線

$f(x) = x^2 - 2$ でやってみよう！（各自試みよ）

Newton スキーム

Scheme. Newton 法の漸化式

$$\begin{cases} x_0 & \cdots & \text{given (適当/テキトーな実数)} \\ x_{n+1} & = & x_n - \dfrac{f(x_n)}{f'(x_n)} \end{cases}$$

- この漸化式のことを Newton 法のスキームと言う
（あるいは単に Newton スキームとも）
- スキームの導出もカンタンな高校数学なので演習問題ということで

Newton スキーム

Example. 放物線

再び $f(x) = x^2 - 2$ で考えてみよう。

$$f'(x) = 2x$$

なので、 Newton スキームは、

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n - \frac{x_n^2 - 2}{2x_n} \\ &= \frac{x_n}{2} + \frac{1}{x_n} \end{aligned}$$

となる。

バビロニアの平方根

Method.

1. 求めたい数 $\sqrt{2}$ よりも大きい近似値を一つ選ぶ。例えば $x_0 = 1.5$ とする。
2. $(\sqrt{2})^2/x_0$ は $\sqrt{2}$ よりも小さい近似値になる。
3. 大きい近似値と小さい近似値の平均 をとれば、より良い近似値が得られる。これを x_1 とする。
4. 実は新しい近似値 x_1 は $\sqrt{2}$ よりも必ず大きい。そこで、1 に戻り x_0 の代わりに x_1 を用いてこの計算を繰り返す。

バビロニアの平方根

- 実はバビロニアの平方根は、$f(x) = x^2 - 2$ に対する Newton 法だった!
- 実際、

$$x_{n+1} = \frac{1}{2}\left(x_n + \frac{2}{x_n}\right)$$

($\sqrt{2}$ の大きい近似 x_n と小さい近似 $2/x_n$ の平均)

Newton 法の収束性

Theorem. Newton 法の収束定理

a を f の根とする。f が a の近傍で C^2 級で $f'(a) \neq 0$ を満たすならば、Newton 法による数列 $\{x_n\}$ は a に収束する。（但し、初期値 x_0 を a の十分近くにとるものとする。）

Statement. 上の定理の意味

f がイイ感じのやつで初期値 x_0 もイイ感じにとれれば Newton 法はちゃんと収束するヨ!

Newton 法の収束性

Corollary. Newton 法の二乗収束定理

定理と同じ条件の下で、"誤差" $e_n = x_n - a$ に対し、ある正の定数 C が存在して以下の不等式が成り立つ:

$$\left|e_{n+1}\right| < C \left|e_n\right|^2$$

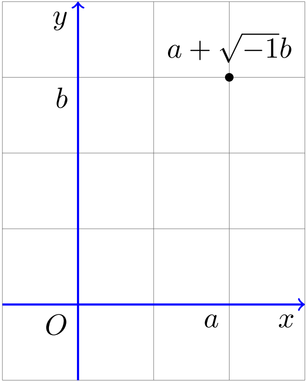
Statement. 上の系の意味

実は Newton 法の収束はメチャ速いヨ! 暴速だヨ!

Section 3

Newton's Method (case $\mathbf{C}$)

複素数



Definition. 複素数

"複素数" 全体の集合を $\mathbf{C}$ と書く、即ち

$$\mathbf{C} = \{\, x + \sqrt{-1}y \mid x, y \in \mathbf{R} \,\}$$

Remark. ガウス平面

平面座標の点を、(a, b) と書く代わりに $a + \sqrt{-1}b$ と一つの数のように書き表す (そう約束する)

複素数

Remark.

- 複素数同士の掛け算が定義できる
- 複素変数として $z = x + \sqrt{-1}y$ を用いることが多い

Definition. 絶対値

$$|z| = \sqrt{x^2 + y^2}$$

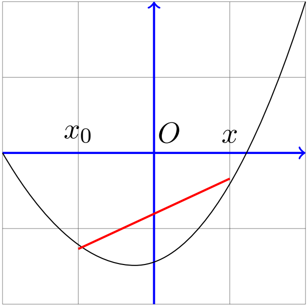
複素変数複素数値関数の微分

- 複素関数 $F : \mathbf{C} \to \mathbf{C}$ の微分を定義したい
- 実関数 $f : \mathbf{R} \to \mathbf{R}$ の微分の場合の、"傾き" という直感的な理解は、一旦忘れる
  - $f(x) = f(x_0) + a(x - x_0) + o(|x - x_0|)$ の式で微分を捉える
  - 抽象化は数学最大の武器!
  - 分からなくなったいつでも具体例に戻ればよい

実変数実数値関数の微分

Definition. 実関数の微分 (復習)

$$f'(x_0) = \lim_{x \to x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$$



複素変数複素数値関数の微分

- 複素関数 $F : \mathbf{C} \to \mathbf{C}$ の微分を定義したい
- 実関数 $f : \mathbf{R} \to \mathbf{R}$ の微分の場合の、"傾き" という直感的な理解は、一旦忘れる
  - $f(x) = f(x_0) + a(x - x_0) + o(|x - x_0|)$ の式で微分を捉える
  - 抽象化は数学最大の武器!
  - 分からなくなったいつでも具体例に戻ればよい

実変数実数値関数の微分

Proposition. 同値な定義

以下は同値である:

- f が x_0 において微分可能で、微分係数 $f'(x_0) = a$
- $x \to x_0$ の時、 $f(x) = f(x_0) + a(x - x_0) + o(|x - x_0|)$

Remark. ランダウの o 記法

$o(h)$ は、h が小さくなる $(h \to 0)$ に従って $o(h)$ も小さくなり無視できる ことを表している。
より正確には、

$$\lim_{h \to 0} \frac{o(h)}{h} = 0$$

複素変数複素数値関数の微分

- 複素関数 $F : \mathbf{C} \to \mathbf{C}$ の微分を定義したい
- 実関数 $f : \mathbf{R} \to \mathbf{R}$ の微分の場合の、"傾き" という直感的な理解は、一旦忘れる
  - $f(x) = f(x_0) + a(x - x_0) + o(|x - x_0|)$ の式で微分を捉える
  - 抽象化は数学最大の武器!
  - 分からなくなったいつでも具体例に戻ればよい

複素変数複素数値関数の微分

Definition. 複素関数の微分

ある $A \in \mathbf{C}$ があって、$z \to z_0$ の時

$$F(z) = F(z_0) + A(z - z_0) + o(|z - z_0|)$$

ならば、F は z_0 において微分可能であるといい、微分係数を $F'(z_0) = A$ と書く。

複素変数複素数値関数の微分

Example. 複素多項式関数の微分

$F_n(z) = z^n$ の時、

$$
\begin{aligned}
& F_n(z) - F_n(z_0) - nz_0^{n-1}(z - z_0) \\
= \ & z^n - z_0^n - nz_0^{n-1}(z - z_0) \\
= \ & (z - z_0)\left(z^{n-1} + \cdots + zz_0^{n-2} + z_0^{n-1}\right) - nz_0^{n-1}(z - z_0) \\
= \ & (z - z_0)\left\{\left(z^{n-1} - z_0^{n-1}\right) + \cdots + \left(zz_0^{n-2} - z_0^{n-2}\right)\right\} \\
= \ & (z - z_0)^2 \left\{(n-2) \text{ 次以下の多項式}\right\} \\
= \ & o(|z - z_0|) \quad (\text{但し } z \to z_0 \text{ の時})
\end{aligned}
$$

が成り立つから、微分は $F_n'(z_0) = nz_0^{n-1}$ となる

複素変数複素数値関数の微分

- 複素関数の微分も実関数の場合とだいたい同じ

Newton 法

- 複素数の場合の Newton 法を考えたい
- 古典的 Newton 法の場合の、“接線を引く” という幾何学的なイメージは、一旦忘れる
  - Newton スキームが Newton 法の本質
  - 抽象化は数学最大の武器!
  - 分からなくなったいつでも具体例に戻ればよい
  - .oO((あ、概念の使い回しだ)) [あ、スライドの使い回しだ]

Newton スキーム

Scheme. Newton 法の漸化式

$$\begin{cases} z_0 & \cdots & \text{given (適当/テキトーな複素数)} \\ z_{n+1} & = & z_n - \dfrac{F(z_n)}{F'(z_n)} \end{cases}$$

Newton 法の収束性

Theorem. Newton 法の収束定理

α を F の根とする。F が α の近傍で C^2 級で $F'(\alpha) \neq 0$ を満たすならば、Newton 法による数列 $\{z_n\}$ は α に収束する。(但し、初期値 z_0 を α の十分近くにとるものとする。)

Corollary. Newton 法の二乗収束定理

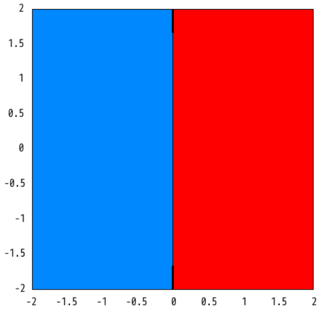
定理と同じ条件の下で、"誤差" $e_n = z_n - \alpha$ に対し、ある正の定数 C が存在して以下の不等式が成り立つ:

$$|e_{n+1}| < C\,|e_n|^2$$

Newton 法の収束領域

- ところで、"初期値 z_0 を α の十分近くにとる" って···
- ぶっちゃけ どれくらい近く にとれば収束するの?
- どの初期値 から どの根 に収束するの?

Newton 法の収束領域



関数

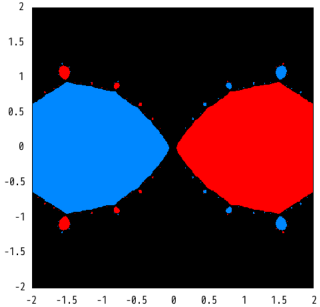
- $F(z) = z^2 - 2$
- $F'(z) = 2z$

初期点の色と収束先の対応

青 は $-\sqrt{2}$

赤 は $\sqrt{2}$

Newton 法の収束領域



関数

- $F(z) = 2z^{-2} - 1$
- $F'(z) = -4z^{-3}$

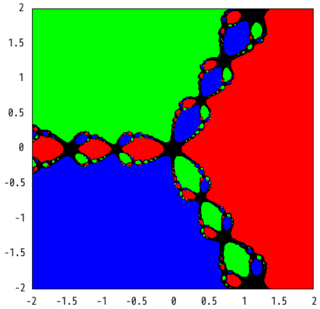
初期点の色と収束先の対応

青 は $-\sqrt{2}$

赤 は $\sqrt{2}$

黒 は発散

Newton 法の収束領域



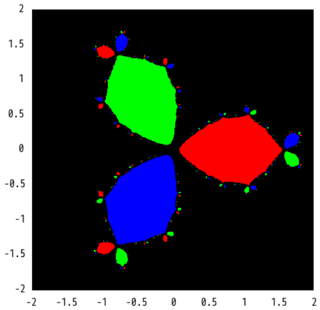
関数

- $F(z) = z^3 - 1$
- $F'(z) = 3z^2$

初期点の色と収束先の対応

緑 は $(-1 + \sqrt{-3})/2$
青 は $(-1 - \sqrt{-3})/2$
赤 は 1
黒 は発散

Newton 法の収束領域



関数

- $F(z) = z^{-3} - 1$
- $F'(z) = -3z^{-4}$

初期点の色と収束先の対応

緑 は $(-1+\sqrt{-3})/2$
青 は $(-1-\sqrt{-3})/2$
赤 は 1
黒 は発散

Section 4

Newton's Method (case X)

ノルム空間

- 以下、$(X, \|\cdot\|)$ をノルム空間とする。

Example. ノルム空間

ユークリッド空間 $X = \mathbf{R}^n,\ \|x\| = \sqrt{x_1^2 + \cdots + x_n^2}$

連続関数の空間 $X = \mathbf{C}[0,1],\ \|f\| = \max |f(x)|$

L^p 空間 $X = L^p(\Omega),\ \|f\| = \left\{\int_\Omega |f|^p \,\mathrm{d}\mu\right\}^{1/p}$

フレシェ微分

Definition. フレシェ微分

ある有界線型作用素 $\mathcal{A}: X \to X$ があって、$u \to u_0$ の時

$$\mathcal{F}(u) = \mathcal{F}(u_0) + \mathcal{A}(u - u_0) + o(\|u - u_0\|)$$

ならば、$\mathcal{F}$ は u_0 においてフレシェ微分可能であるといい、フレシェ微分を $\mathcal{F}'[u_0] = \mathcal{A}$ と書く。

Remark.

- $\mathcal{A}$ が作用素に変わった所に要注意 (複素微分との一番の違い)
- 一般には X の元同士の "割り算" も定義されていないことに注意

Newton 法

Scheme. 一般の Newton 法の漸化式

$$\begin{cases} u_0 & \cdots & \text{given} \\ u_{n+1} & = & u_n - \mathcal{F}'[u_n]^{-1}\mathcal{F}(u_n) \end{cases}$$

Newton 法

- 一般 Newton 法でも、同様の定理が成り立つ (略)
- 但し、 X の完備性と $\mathcal{F}$ の 2 階フレシェ微分可能性を仮定する

応用

Newton 法の特徴

長所 収束が速い
根に近い時 "安定"

短所 根から遠い時 "不安定"

応用

- 根の予測がある程度ついているときに、より正確な近似を得るのに利用できる
- 例えば微分方程式 $u'' = \varphi(u)$ の精度保証付き数値計算で、有限次元関数空間での検証能力向上が期待できる
- あくまでヒューリスティクス

応用

Example.

1. 不動点方程式 $u = \mathcal{A}^{-1}(\varphi(u))$
2. $\mathcal{F} = I - \mathcal{A}^{-1}\varphi$ とおいて根探索問題 $\mathcal{F}(u) = 0$ に
3. "Newton 型作用素" $\mathcal{N} = I - \mathcal{F}'^{-1}\mathcal{F}$
4. 同値な不動点方程式 $u = \mathcal{N}(u)$ を得る

まとめ

数値計算 とは、近似解を得るための計算手法
Newton 法 は、根探索問題の数値解法(速い)

- 例示は理解の試金石!
- 抽象化は数学最大の武器!