数値解析

科目番号: FEN-AM2d10L1
標準カリキュラム: 物理工学科, 計数工学科

担当: 松尾 宇泰(計数工学科 数理情報工学コース)
（大学院 情報理工学系研究科 数理情報学専攻）

この講義でやること

「数値解析」 ＝ 問題を **数値**的 に **解析** する

ゴール

- ➢「数値解析」の 用途 （アプリケーション，応用）
- ➢「数値解析」の 使い方 （ツール）
- ➢「数値解析」の 数理 （背後にある数学）

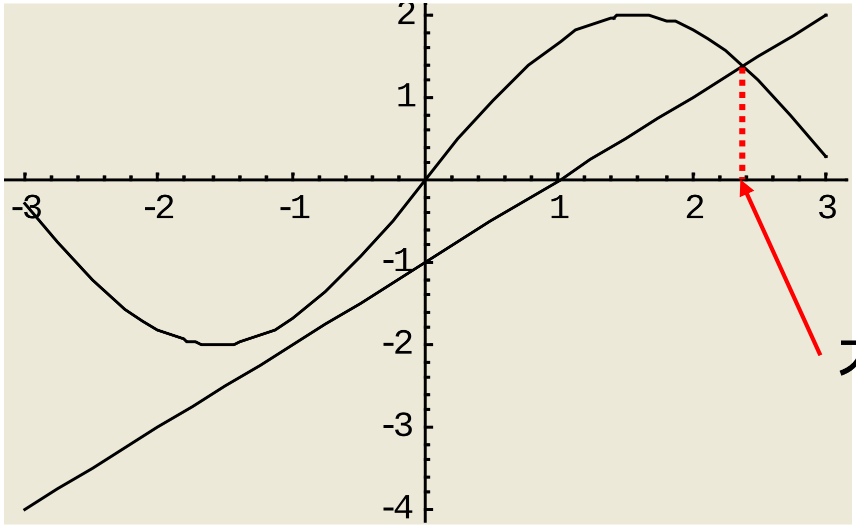
を理解し，使えるようになる．

数値計算とは

「計算機を使って，数学・物理（など）の問題を解くこと」です！

（例）　$2\sin(x) = x - 1$

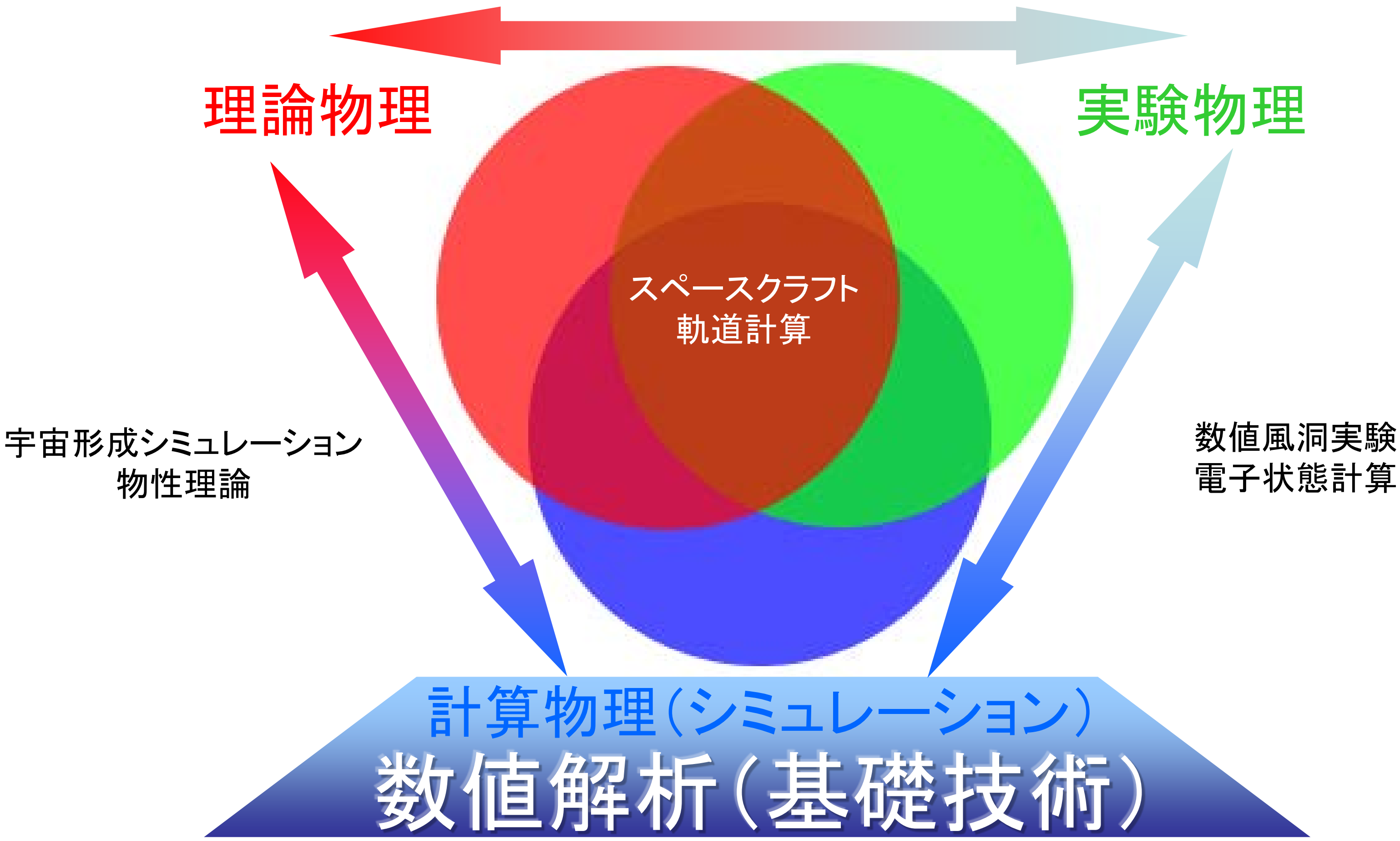
「解析的」（＝紙と鉛筆と手計算）には絶対に解けない．
そこで（計算機で）「グラフ」を描いて解く！



大体 2.38ぐらい

数値解析～シミュレーション時代の基礎科学

例：最近の物理学・・・3分野が協力的に発展



なぜ数値解析を学ぶのか

応用・現実	数理モデル	数学
• 超伝導現象	•Ginzburg-Landau方程式	• 偏微分方程式
• 気象	•Navier-Stokes方程式	• 連立一次方程式
• 金融工学	•Black-Scholes 方程式	• 確率微分方程式
• 量子力学	•Schroedinger方程式	• 固有値問題

計算機

モデリング

数学による解析

数値解析

シミュレーション

なぜ数値解析を学ぶのか（続き）

【FAQ】

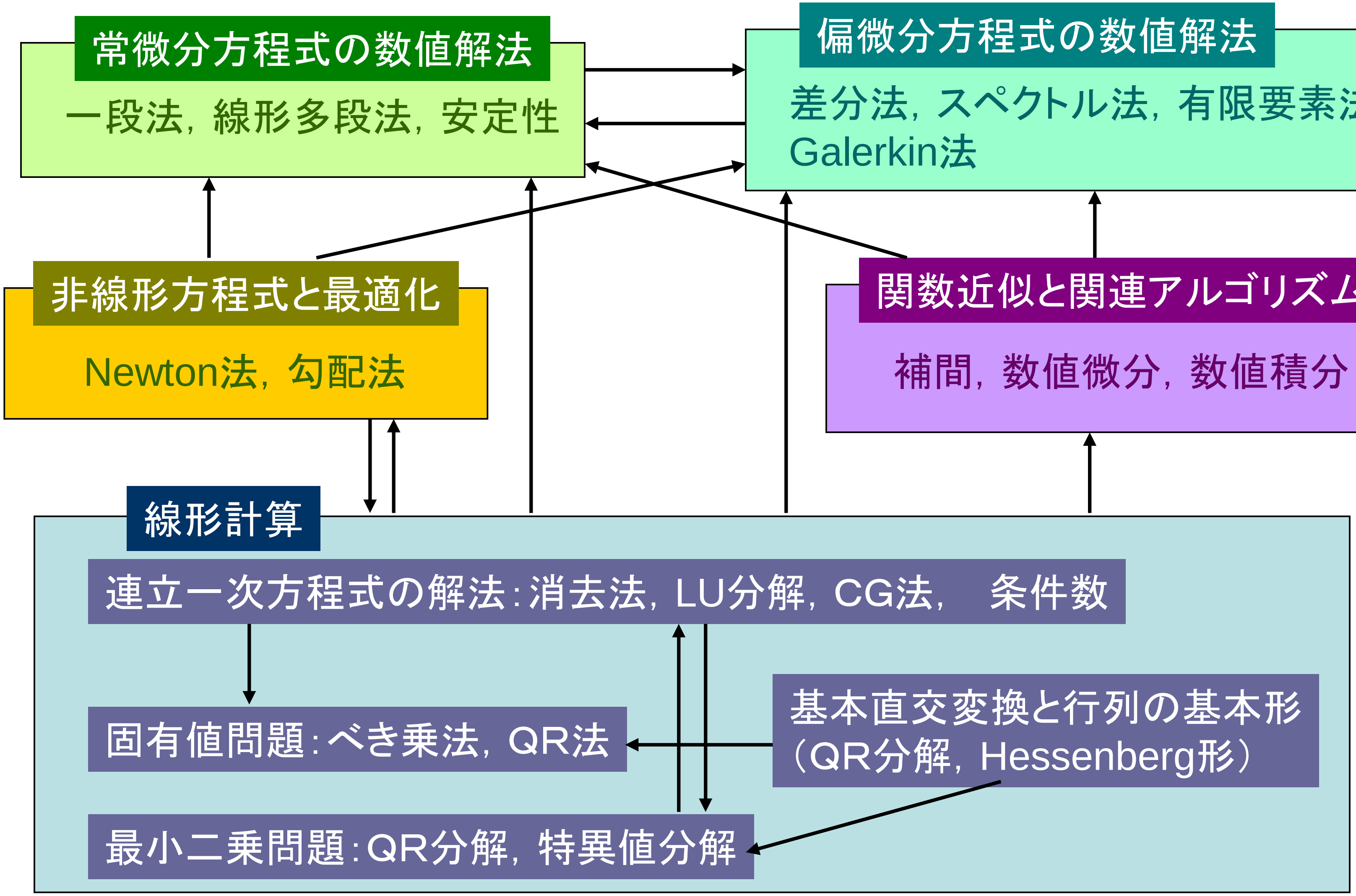
Q. 自分は物工（機械，電気，．．．）だから，
「数値解析」は要りませんね？

A. 卒論～修論～D論～会社のどこかで，きっと一度くらい，
数値計算をする羽目になります．聞いておいて損はありません．

Q. でもお金さえあれば，高い計算機やパッケージを買えば
いいんですよね？

A. ・世界最高性能のスパコンでも，ごく簡単な計算で失敗します．
・あなたの最先端研究をサポートするパッケージがあるとは
限りません．
・同じ計算をするのに，経費100万円を1万円に減らせるかもしれません．

数値解析の全体構造



常微分方程式の数値解法
一段法，線形多段法，安定性
偏微分方程式の数値解法
差分法，スペクトル法，有限要素法
Galerkin法
非線形方程式と最適化
Newton法，勾配法
関数近似と関連アルゴリズム
補間，数値微分，数値積分
線形計算
連立一次方程式の解法：消去法，LU分解，CG法，　条件数
固有値問題：べき乗法，QR法
基本直交変換と行列の基本形
（QR分解，Hessenberg形）
最小二乗問題：QR分解，特異値分解

数値解析をとりまく学問

天文　物質設計　化学反応　ロボット　ネットワーク

電子状態計算　癌治療　データ科学

光学　地震　数理生物　自動車　金融

数値解析

数学

微積分，代数，幾何，
関数解析，非線形数学
微分方程式，確率，．．．

情報科学

アルゴリズム，
アーキテクチャ，
プログラミング，
高性能計算．．．

諸科学

物理学
化学
経済学
．．．

「数値解析」はどこが難しいのか

- 「数値計算」と　　　　「数値解析」
  計算　　　　　　計算による解析・計算の解析

- 根本的な困難：計算機の有限性
  有限のメモリ，有限の数値，有限の手順，四則演算
  すべては 無限 との戦い（微分，積分，．．．）

- 計算量：O(n) 快適… O(n^2) 実用… O(n^3) 許容…

- 数学的に有意でも，数値解析的に有意でない道具もある（計算可能性，安定性，．．．）

- 数学 を 計算機 に載せようとして起こる困難を解決し，「数値計算」を保証して現代科学を支えるのが「数値解析」

計算の怖さと愉しさ・・・例題1： 漸化式の計算

3項間漸化式： 高校生でも解ける・計算できる.
例えば. . .

$$x_{n+2} - \left(100 + \frac{1}{2}\right) x_{n+1} + \frac{100}{2} x_n = 0.$$

$$\Rightarrow (x - 100)\left(x - \frac{1}{2}\right) = 0$$

答は：

$$x_n = c_1 \cdot \frac{1}{2^n} + c_2 \cdot 100^n.$$

初期値 x_1, x_2 で決まる係数.

たとえば, $x_1 = 2, x_2 = 1$ とすると, $x_n = 2 \cdot \frac{1}{2^{n-1}}$

（つまり $c_1=4$, $c_2=0$）

例題1： 計算機にやってもらうと

$$x_{n+2} - \left(100 + \frac{1}{2}\right) x_{n+1} + \frac{100}{2} x_n = 0.$$

例: $x_1 = 2, x_2 = 1$ ⇨ $x_n = 2 \cdot \frac{1}{2^{n-1}}$

1	2.000000	11	1.9531250E-03
2	1.000000	12	9.7656250E-04
3	0.5000000	13	4.8828125E-04
4	0.2500000	14	2.4414063E-04
5	0.1250000	15	1.2207031E-04
6	6.2500000E-02	16	6.1035156E-05
7	3.1250000E-02	17	3.0517578E-05
8	1.5625000E-02	18	1.5258789E-05
9	7.8125000E-03	19	7.6293945E-06
10	3.9062500E-03	20	3.8146973E-06

正しい.

例題1：　すこし改題

では少し問題を変えたら？

$$x_{n+2} - \left(100 + \frac{1}{3}\right)x_{n+1} + \frac{100}{3}x_n = 0.$$

答：　$x_n = c_1 \cdot \frac{1}{3^n} + c_2 \cdot 100^n.$

例：　$x_1 = 3, x_2 = 1 \Longrightarrow x_n = 3 \cdot \frac{1}{3^{n-1}}$

（つまり $c_1=9$,　$c_2=0$）

数学的な本質は全く同じ.　計算結果も同じですか？

例題1： 改題の計算結果

$$x_{n+2} - \left(100 + \frac{1}{3}\right) x_{n+1} + \frac{100}{3} x_n = 0.$$

例： $x_1 = 3, x_2 = 1$ ⇒ $x_n = 3 \cdot \dfrac{1}{3^{n-1}}$

→やってみましょう

1	3.000000	11	6.4004207E+10
2	1.000000	12	6.4004209E+12
3	0.3333397	13	6.4004213E+14
4	0.1117511	14	6.4004217E+16
5	0.1010412	15	6.4004221E+18
6	6.412765	16	6.4004222E+20
7	640.0461	17	6.4004226E+22
8	64004.20	18	6.4004230E+24
9	6400420.	19	6.4004233E+26
10	6.4004205E+08	20	6.4004235E+28

？？？？

← 正解は
2.58117E-9

例題1： 惨事の原因は計算機の「有限性」

計算機が理解する漸化式（小数形式）：

「2」 $x_{n+2} - (100 + 0.5)\,x_{n+1} + 50x_n = 0.$

「3」 $x_{n+2} - (100 + 0.33333333)\,x_{n+1} + 33.333333x_n = 0$

この 「ずれた」 漸化式の解は（近似的に），

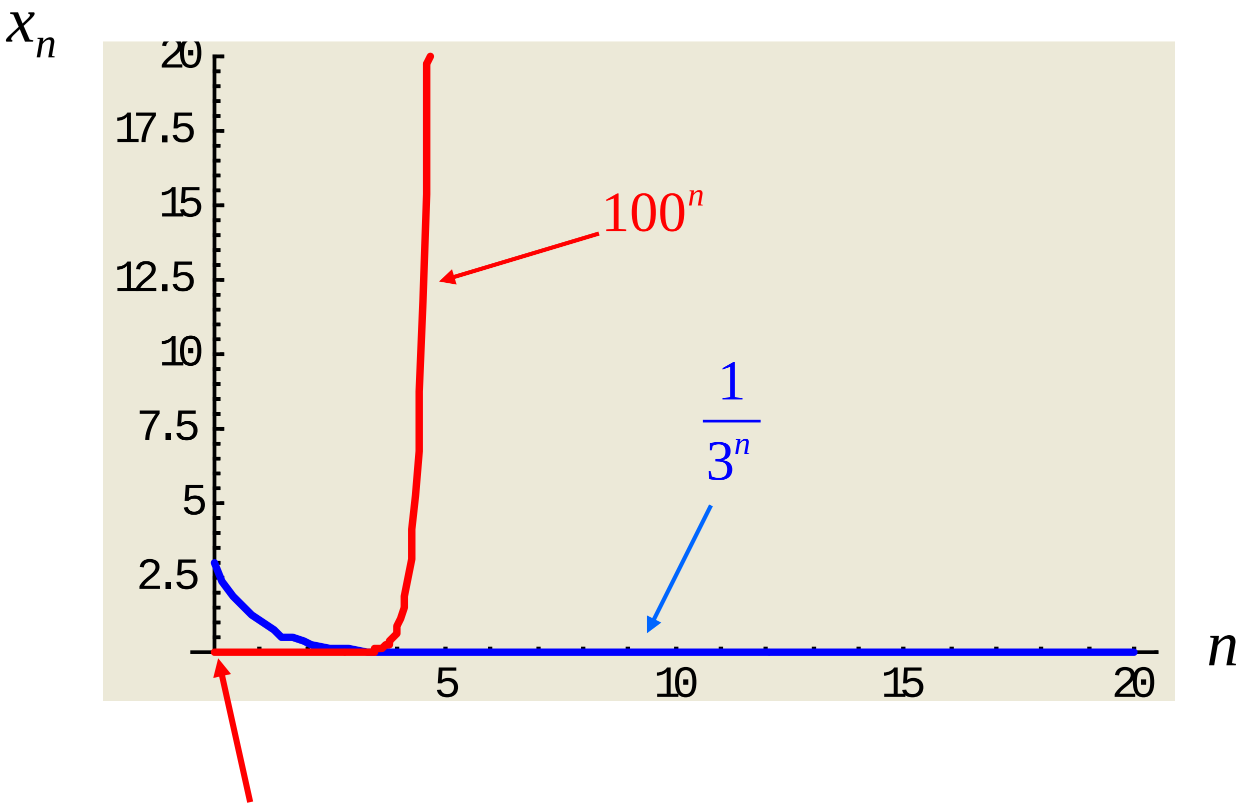
$$x_n = c_1 \cdot 0.33333334^n + c_2 \cdot 99.999666^n.$$

これを，初期値 $x_1 = 3, x_2 = 1$ から始めると，

$$c_1 \cong 8.99999979, \quad c_2 = 2.34896725 \times 10^{-12} \neq 0.$$

これがすべてを台無しにする

例題1：「欲しくない」解が「欲しい」解を消す



始まりでは無視できるほど小さい（1/10,000,000,000）が，あっという間に爆発して「欲しい解」を潰す．

例題1： 計算機の中は落とし穴だらけ

$$x_{n+2} - \left(100 + \frac{1}{2}\right) x_{n+1} + \frac{100}{2} x_n = 0.$$

例： $x_1 = 2, x_2 = 1.0000001$ ⇒ $x_n \cong 2 \cdot \frac{1}{2^{n-1}}$

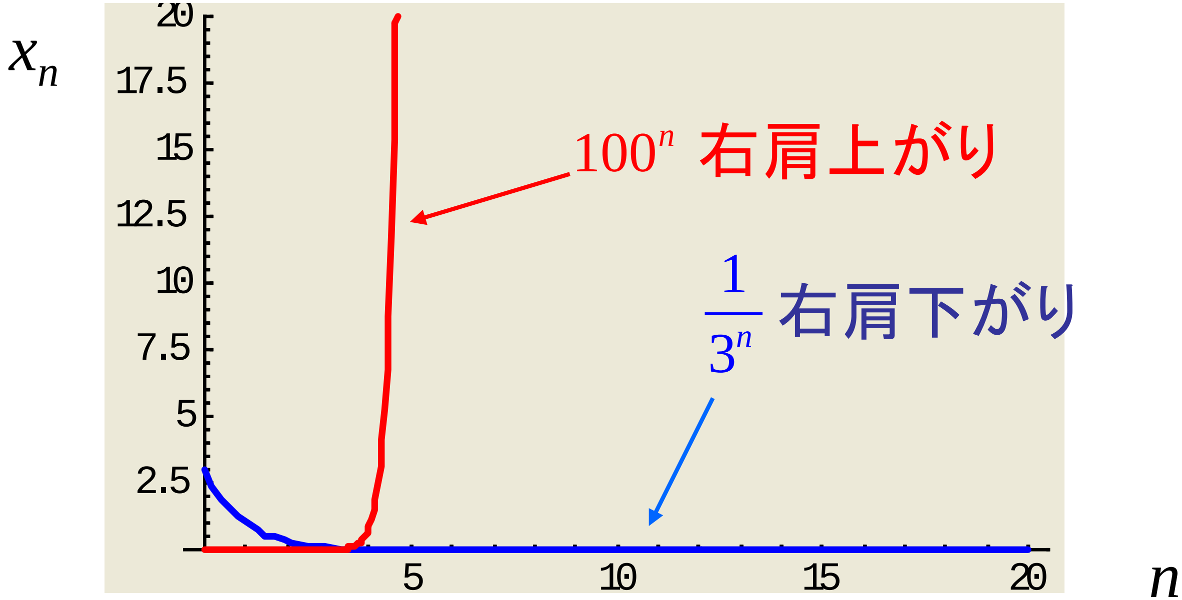
1	2.000000	11	1.1980834E+11
2	1.000000	12	1.1980833E+13
3	0.5000120	13	1.1980833E+15
4	0.2511981	14	1.1980833E+17
5	0.2448083	15	1.1980833E+19
6	12.04333	16	1.1980833E+21
7	1198.115	17	1.1980833E+23
8	119808.3	18	1.1980833E+25
9	1.1980833E+07	19	1.1980833E+27
10	1.1980833E+09	20	1.1980833E+29

爆発.

例題1： 対策・・・落とし穴からどう逃げるか

これは数値解析では有名な問題．（→Bessel関数の計算）

[対策] この（種の）漸化式： 前から後ろに計算してはダメ



100^n が優越

これを裏返すと・・・

$\frac{1}{3^n}$ が優越

1/3 の項が欲しいのなら，「後ろ向き」に計算すべき

例題1：「後ろ向き」に計算するには

$$x_{n+2} - \left(100+\frac{1}{3}\right)x_{n+1} + \frac{100}{3}x_n = 0 \Leftrightarrow x_n = \frac{301}{100}x_{n+1} - \frac{3}{100}x_{n+2}$$

（☆）

x_{20} までが欲しいとしましょう. $x_1 = 3, x_2 = 1$

1. まず $x_{29}=3$, $x_{30}=1$ と勝手におく.

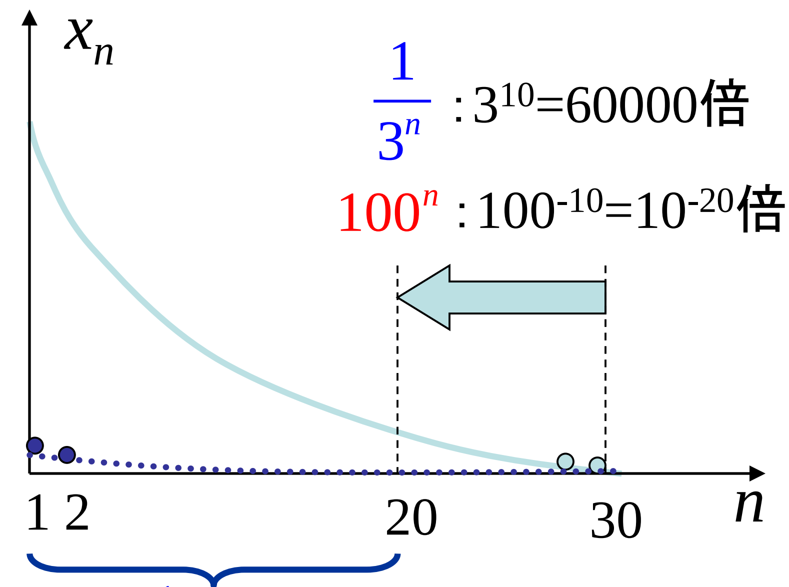
$$x_n = c_1 \cdot \frac{1}{3^n} + c_2 \cdot 100^n.$$

$\sim 2.06\times 10^{14}\uparrow$ $\uparrow\sim 0$

2. （☆）を 左向きに 解く.

$$x_1, x_2, \ldots, x_{27}, x_{28}.$$

$\sim 10^{13}$



ほぼ $\frac{1}{3^n}$ の項しかない

$$x_n = c_1 \cdot \frac{1}{3^n} + \cancel{c_2 \cdot 100^n}.$$

例題1：「後ろ向き」に計算するには(続き)

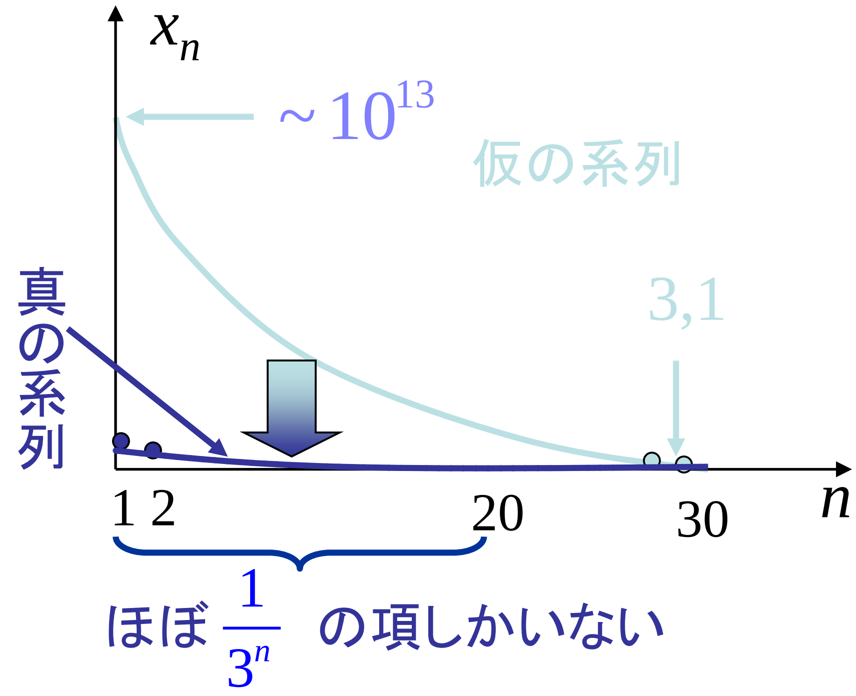
3. 「真の系列」と「仮の系列」は，n=20 ぐらいまでなら，

仮：$x_n = \boxed{c_1} \cdot \dfrac{1}{3^n}, \quad x_1 \sim 10^{13}, x_2 \sim 10^{13} \quad (x_{29} = 3, x_{30} = 1)$

真：$x_n = \boxed{\tilde{c}_1} \cdot \dfrac{1}{3^n}, \quad x_1 = 3, x_2 = 1$

係数が違うだけ
（全体に何倍かされている）

そこで，x_1 の値を見て
全体を「つぶす」.



例題1： 賢い方法の計算結果

$$x_{n+2} - \left(100 + \frac{1}{3}\right) x_{n+1} + \frac{100}{3} x_n = 0.$$

例： $x_1 = 3, x_2 = 1$ ⇨ $x_n = 3 \cdot \frac{1}{3^{n-1}}$

1	3.000000	11	5.0805265E-05
2	1.000000	12	1.6935088E-05
3	0.3333333	13	5.6450290E-06
4	0.1111111	14	1.8816763E-06
5	3.7037037E-02	15	6.2722546E-07
6	1.2345678E-02	16	2.0907515E-07
7	4.1152262E-03	17	6.9691723E-08
8	1.3717421E-03	18	2.3230573E-08
9	4.5724740E-04	19	7.7435240E-09
10	1.5241580E-04	20	2.5811748E-09

正しい！

← 正解は 2.58117E-9

教訓

- 計算機の中の世界：
  「無限」を前提に組み立てた数学の世界
  　　から見ると
  「有限」しか許されない故に　不完全で壊れている
- その世界で，なお 数学 をやるにはどうしたらよいのか
  数学を使って考えよう　　それで科学の世界を進めよう

- 常にできるとは限らない　（残念ながら）
  できると楽しい

- 数値解析学者　は　ゴミ（誤差）収拾人　ではなく
  優れた 分析官・司令官

例題2： 超伝導現象のシミュレーション

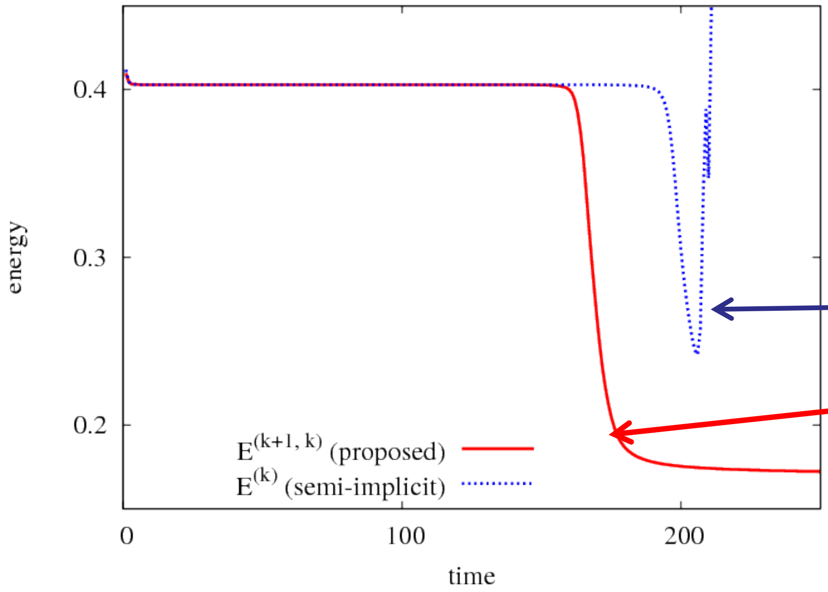
$$\eta\psi_t + \frac{1}{2}\left\{\left(\frac{\mathrm{i}}{\kappa}\nabla + \mathbf{A}\right)^2 \psi + (|\psi|^2 - 1)\psi\right\} = 0, \quad \mathbf{A}_t + \mathrm{Re}\left[\overline{\psi}\left(\frac{\mathrm{i}}{\kappa}\nabla + \mathbf{A}\right)\psi\right] + \nabla\times(\nabla\times\mathbf{A} - \mathbf{H}) = 0.$$

物理的「エネルギー」散逸則：
（GL自由エネルギーの減少）

$$\int_\Omega \frac{1}{2}\left|\left(\frac{\mathrm{i}}{\kappa}\nabla + \mathbf{A}\right)\psi\right|^2 + \frac{1}{4}(1-|\psi|^2)^2 + \frac{1}{2}|\nabla\times\mathbf{A} - \mathbf{H}|^2 dx \le 0.$$

「自然は最小を好む」

数学表現： 幾何学的勾配流 $\eta\psi_t + \dfrac{\delta F}{\delta\overline{\psi}} = 0, \quad \mathbf{A}_t + \dfrac{1}{2}\dfrac{\delta F}{\delta\mathbf{A}} = 0.$

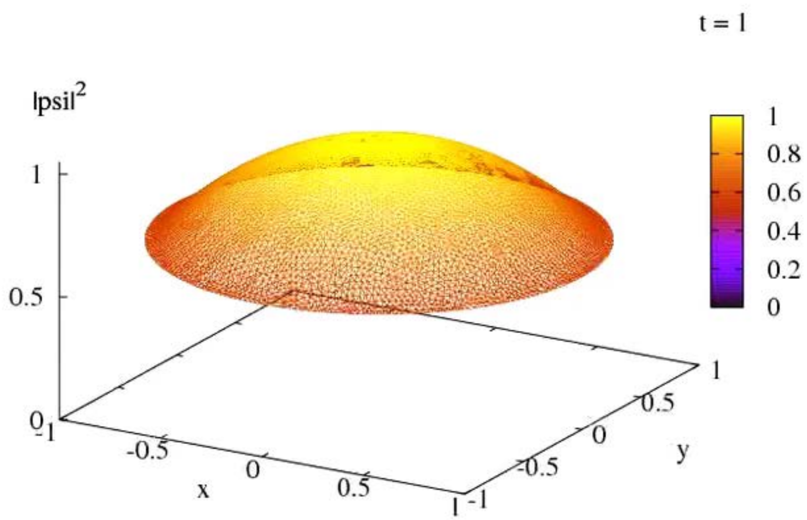


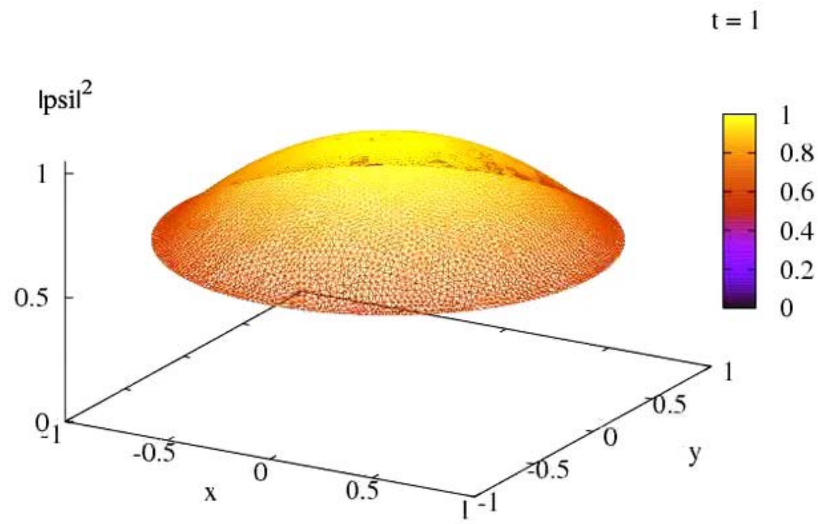
標準的な半陰的スキーム

有限次元勾配流になるように作ったスキーム

[Torii-M. (2010)] +Mori, Kuramae

例題2： 超伝導現象の計算例





標準的な半陰的スキーム

「エネルギー」が正しく
減少するように作ったスキーム

まとめ：「数値解析」を学ぶには

ゴール

- 「数値解析」の　用途　（アプリケーション，応用）
- 「数値解析」の　使い方　（ツール）
- 「数値解析」の　数理　（背後にある数学）

　　を理解し，使えるようになる．

ゴール（アプリケーション）　をイメージしながら，
ツール　を学び，　万一の際のためにその背後にある
数理　を理解してください．

計算環境と講義HP

プログラミング言語:

C, C++, Java, Fortran, Pascal, . . .

数値計算ソフトウェア:

Mathematica, Matlab, Scilab

講義HP: （サンプルプログラム等掲載予定）

http://www.sr3.t.u-tokyo.ac.jp/matsuo/?page_id=499

※年度末には非公開になります.

以上

参考文献

『数値解析入門[増訂版]』
（山本哲朗;サイエンス社）

『数値解析[第2版]』
（森正武;共立出版）