課題

$f(x) = \exp(x) + x = 0$ の解を二分法を使って解け。

Excelなどを使ってもいいし、pythonなどのプログラムを作ってもよい。

余力があれば、Newton-Raphson法でも解いてみるといい。

参考:
http://conf.msl.titech.ac.jp/Lecture/

- 計算材料学特論 資料

PowerPointのプレゼンテーションファイルにして提出
期限: 今日の17:00までに
できたところまでで可

収束計算の収束判定

- **F(x) = 0 となる x を求めよ**

case F: 収束判定条件を eps より小さくなるとして、

abs(F(x_{i+1})) < eps

とすると、dF/dx が 1 より非常に小さい場合は x の精度が悪くなる。

eps = 10^{-6}として、$F(x) = 10^{-10}(\exp(x) + x)$ を考えてみよう。

case x: abs(x_{i+1} - x_i) < eps

とすると、dF/dx が 1 より非常に大きい場合は F(x) の精度が悪くなる。

eps = 10^{-6}として、$F(x) = 10^{10}(\exp(x) + x)$ を考えてみよう。

※ 目的による。xの精度だけが必要なら、F(x)での収束判定はしなくてもいい

良い方法: 2つのeps、xeps と yepsを用いる。

$F(x) = 10^{-10}(\exp(x) + x)$

xeps = 1.0e-6

yeps = 1.0e-16

abs(x_{i+1} - x_i) < xeps and abs(F(x_{i+1})) < yeps

- **F(x) を最小 (最大) にする x を求めよ**

変化量で収束判定をする

abs(x_{i+1} - x_i) < xeps and abs(F(x_{i+1}) – F(x_i)) < yeps

収束計算における最終精度の判定

収束計算において、最終的な解の精度を正確に知ることは難しい

繰り返し計算において、x_0 => x_1 => x_2 => … => x_{n-1} => x_n と、パラメータが順次変化していくため、たとえば $x_n - x_{n-1}$ = 1.0e-6 になったとしても、そのあと 10サイクル同様の変化が続けば、x_{n+10}は x_{n-1} より 2.0e-6 変化することになる。

**=> 一般の収束計算 (Newton-Raphson法など) での最終解の精度は、
あくまでも「収束精度」**

X	F(x)
-0.567143226	1.0145674E-07
-0.567143357	-1.0404311E-07
-0.567143291	-1.2931852E-09

の結果からは、**収束解は -0.567143 と言える**。

一部のアルゴリズムでは、解の精度を正確に判定できる

二分法: 解 x は初期値区間 [xmin, xmax] 内に存在する。

一回の計算で範囲を ½ にする

＝＞ n回の繰り返しで範囲は（xmax – xmin) / 2^n に狭まる。これが最終解の精度

※ 二分法の場合、繰り返し回数で精度が確定するので、収束判定条件は必要ではない

単調関数方程式の解法: 二分(Bisection)法

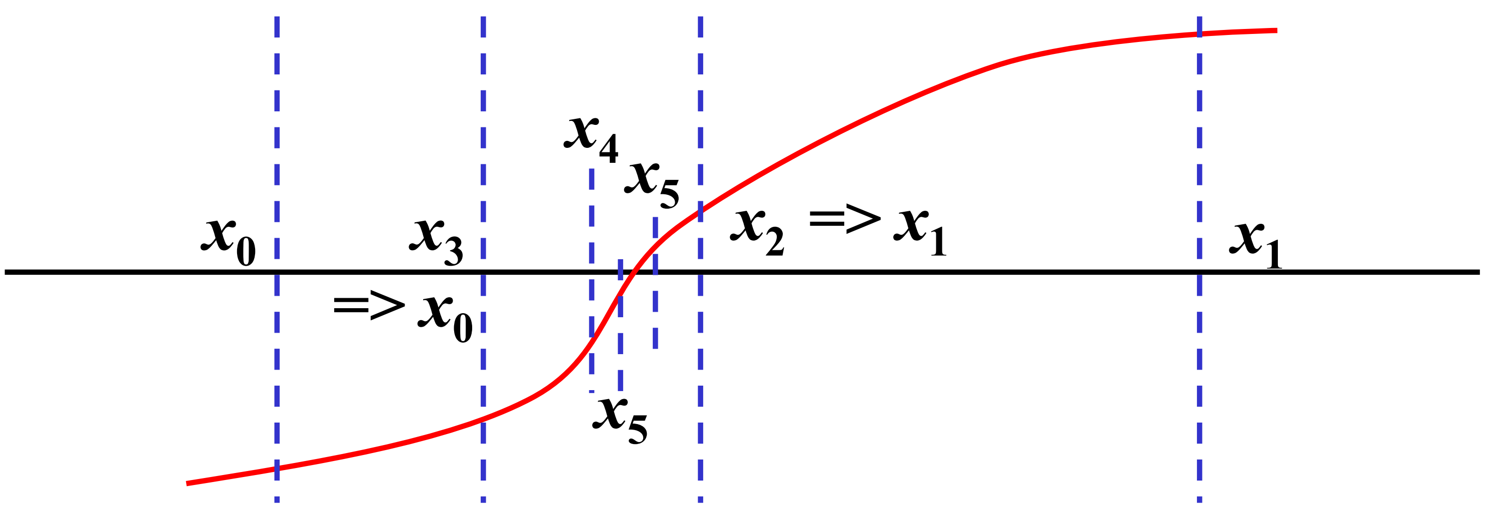
単調関数 $f(x) = 0$ の解

$f(x_0) < 0$ かつ $f(x_1) > 0$ (あるいは $f(x_0) > 0$ かつ $f(x_1) < 0$)
の区間 $[x_0, x_1]$から反復的に解く

$f(x)$ が単調関数であれば、解 x はかならず $x_0 < x < x_1$

$f(x_0) < 0$ かつ $f(x_1) > 0$の場合を考える ($f(x_0)\cdot f(x_1) < 0$ で判断)。

1. $x_2 = (x_0 + x_1) / 2.0$
2. $f(x_2) > 0$ ($f(x_0)\cdot f(x_2) < 0$) であれば、x_1 をx_2 で置き換える
   $f(x_2) < 0$ ($f(x_1)\cdot f(x_2) < 0$) であれば、x_0 をx_2 で置き換える
3. $|x_1 - x_0|$, $|f(x_1) - f(x_0)|$ が必要な精度以下になったら、
   解を x_2 にして反復終了
4. 1. に戻って反復



Newton-Raphson法 (Newton法)

$f(x) = 0$の解を求める

$$f(x_0+dx) = f(x_0) + dx\, f'(x_0) \sim 0$$

$$\Rightarrow \quad x_1 = x_0 + dx = x_0 - f(x_0) \,/\, f'(x_0)$$

計算では $f'(x_0)$ を差分計算で置き換えられる

割線法 (セカント法、はさみうち法):

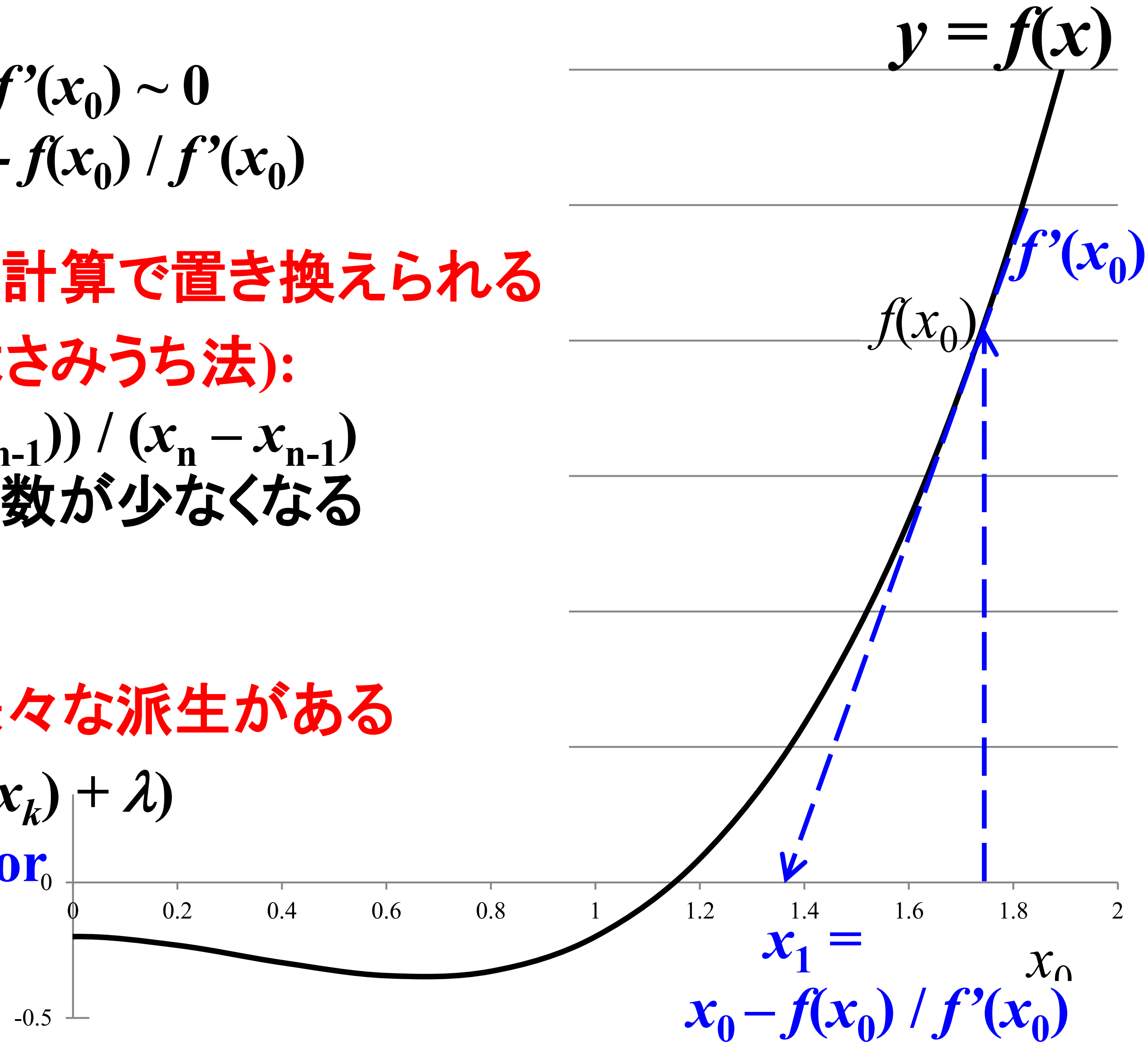
$$f'(x) = (f(x_n) - f(x_{n-1})) \,/\, (x_n - x_{n-1})$$

を使う。$f(x)$の計算回数が少なくなる

発散を抑える工夫で様々な派生がある

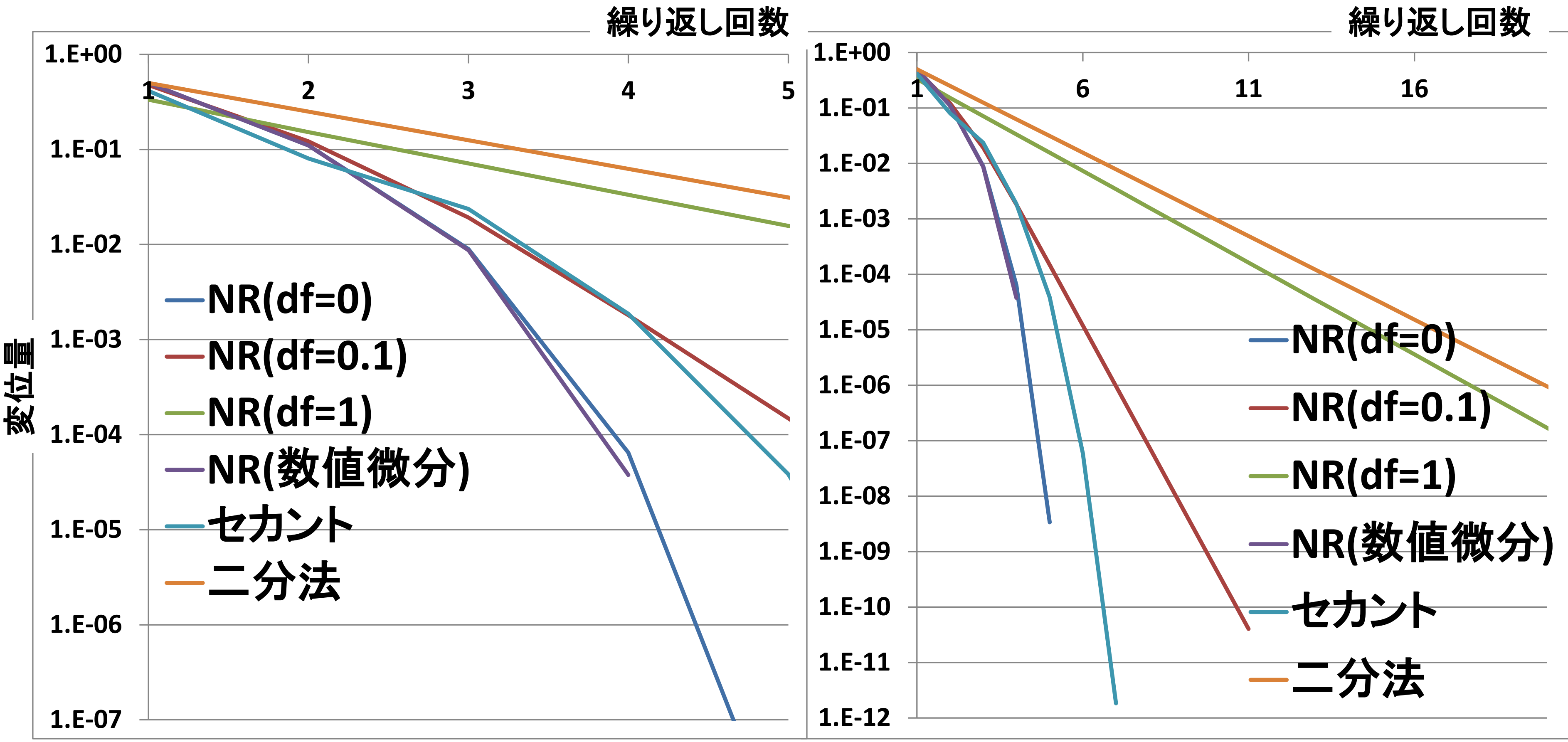
$$x_{k+1} = x_k - f(x_k) \,/\, (f'(x_k) + \lambda)$$

λ: Dumping Factor



収束過程の比較

$f(x) = \exp(x) - 3x = 0$ (初期値 $x = 0$)　精確値 0.619061



NR: Newton-Raphson法
df: Dumping Factor