

非線型方程式の数値計算法

山本昌志*

2004年7月1日

1 本日の学習内容

1.1 授業のテーマ

本日の授業は、非線型方程式の数値解法について学習する。具体的には、次の

- 2分法
- ニュートン法
- はさみうち法
- 割線法 (セカント法)

について、数値計算テクニックについて講義を行う。この4つ方法のうち、最初の2つが重要である。その内容は簡単なので、頭の中にイメージが沸くであろう。

1.2 授業のゴール

数値計算の授業と言うことでは、以下をゴールとする。

- 4種類の計算方法のイメージがつかめる。グラフにより、計算方法が説明できる。
- 計算方法のフロチャートが書ける。
- それぞれ計算方法に優劣があり、問題により使い分けを行う必要があることが理解できる。

ただし、実際問題としては、C言語でプログラムができるところまでがゴールである。

*国立秋田工業高等専門学校 電気工学科

2 非線型方程式の概要

ここでは、数値計算により方程式の解を求める方法を学習する。次の方程式

$$f(x) = 0 \quad (1)$$

の根 x を求める。方程式の右辺がゼロでない場合は、左辺へ移項して式 (1) の形にできる。

具体的な問題で、これを考える。たとえば、方程式

$$x^3 - 3x^2 + 9x - 8 = 0 \quad (2)$$

の根を求める。これの解析解を求めるのは、ほとんど不可能であろう。こらえ性のない私なんかは、すぐにコンピューターで計算を始めます。ここでは、コンピューターでこれの根を求める方法を学習する。ちなみにこの方程式の根は、

$$x_1 = 1 - 2 \left[\frac{2}{1 + \sqrt{33}} \right]^{1/3} + \left[\frac{1}{2} (1 + \sqrt{33}) \right]^{1/3} \quad (3)$$

$$x_2 = 1 + (1 + \sqrt{3}i) \left[\frac{2}{1 + \sqrt{33}} \right]^{1/3} - \frac{1}{2}(1 - \sqrt{3}i) \left[\frac{1}{2} (1 + \sqrt{33}) \right]^{1/3} \quad (4)$$

$$x_3 = 1 + (1 - \sqrt{3}i) \left[\frac{2}{1 + \sqrt{33}} \right]^{1/3} - \frac{1}{2}(1 + \sqrt{3}i) \left[\frac{1}{2} (1 + \sqrt{33}) \right]^{1/3} \quad (5)$$

と分かっている¹。それにしても、これらの根は良く似ている。不思議なものである。複素平面で考えると、これらが似ているのも分かるような気がする。

ここでは数値計算法により、実数解、すなわち x_1 を求める。むろん、複素数解を求めることも可能であるが、少し難しくなる。実際に、プログラムを作成する前に、実数解の近似値を求めておく。それは、

$$x_1 \simeq 1.1659055841222127171 \dots \quad (6)$$

となる。

式 (2) は 3 次方程式であるが、ここで用いる数値計算のテクニックで解ける問題はべき乗の多項式とは限らない。計算に用いれる領域が連続であれば、どんな方程式でも解ける。三角関数や指数関数、分数の形でも関係なく解ける。

実際には、次の 4 通りの計算テクニック示す。

1. 2 分法
2. ニュートン-ラフソン法 (ニュートン法)
3. はさみうち法
4. 割線法 (セカント法)

¹私は、数式処理システム Mathematica を利用して解いた。

いずれの方法も、 $y = f(x)$ の x 軸と交わる点、即ち $f(x) = 0$ を反復 (ループ) 計算を用いて探している。式 (2) であれば、 $f(x) = x^3 - 3x^2 + 9x - 8$ として計算する。この関数を図 1 にしめす。先の 4 通りの方法で、図 1 の x 軸との交点を計算するのである。

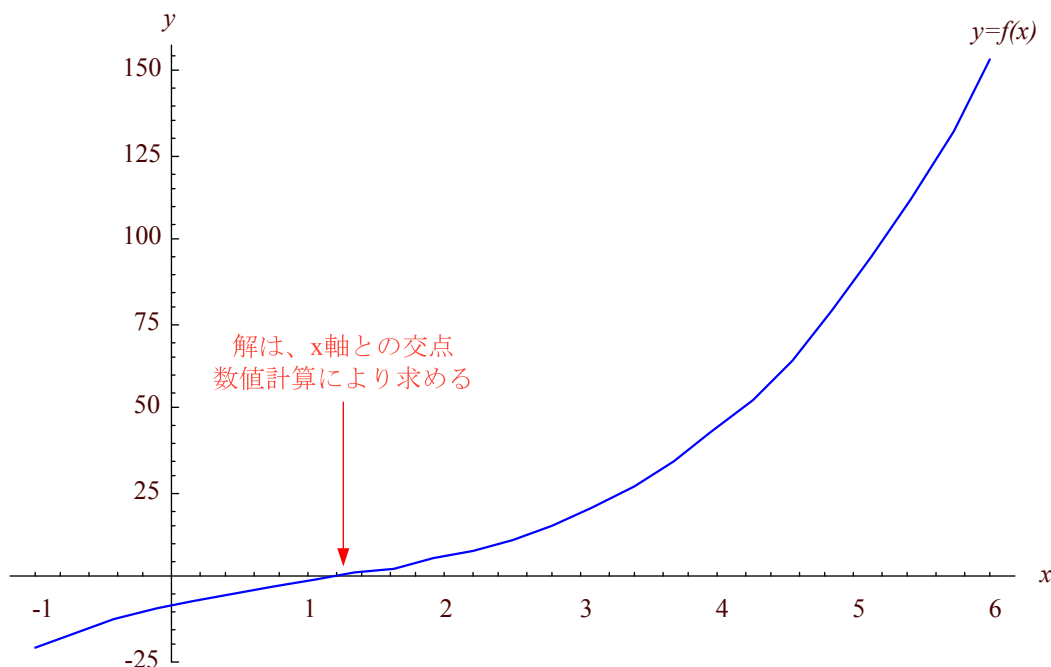


図 1: $f(x) = x^3 - 3x^2 + 9x - 8$ の関数。 x 軸との交点が解である。

3 二分法 (bisection method)

3.1 計算方法

この方法は、非常に単純であるが、場合によっては非常に強力な方法である。考え方の基本は、閉区間 $[a, b]$ で連続な関数 $f(x)$ の値が、

$$f(a)f(b) < 0 \tag{7}$$

ならば、 $f(\alpha) = 0$ となる α が区間 $[a, b]$ にある。これは、中間値の定理から保証される。こんなことを言わないまでもあたりまえである。ただ、連続な区間で適用できることを忘れてはならない。

実際の数値計算は、 $f(a)f(b) < 0$ であるような 2 点 $a, b (a < b)$ から出発する。そして、区間 $[a, b]$ を 2 分する点 $c = (a + b)/2$ に対して、 $f(c)$ を計算を行う。 $f(c)f(a) < 0$ ならば b を c と置き換え、 $f(c)f(a) > 0$ ならば a を c と置き換える。絶えず、区間 $[a, b]$ の間に解があるようにするのである。この操作を繰り返して、区間の幅 $|b - a|$ が与えられた値 ϵ よりも小さくなったならば、計算を終了する。解へ収束は収束率 $1/2$ の一次収束とである。

実際にこの方法で式 (2) を計算した結果を図 2 に示す。この図より、 $f(a)$ と $f(b)$ の関係の式 (7) を満たす区間 $[a, b]$ が $1/2$ ずつ縮小していく様子がわかる。この方法の長所と短所は、以下の通りである。

長所 閉区間 $[a, b]$ に解があれば、必ず解に収束する。間違いなく解を探すので、ロバスト (robust : 強靱な) な解法と言われている。次に示すニュートン法とは異なり、連続であればどんな形の関数でも解に収束するので信頼性が対価方法と言える。さらに、解の精度も分かり便利である。解の誤差は、区間の幅 $|b - a|$ 以下である。

短所 収束が遅い (図 8)。

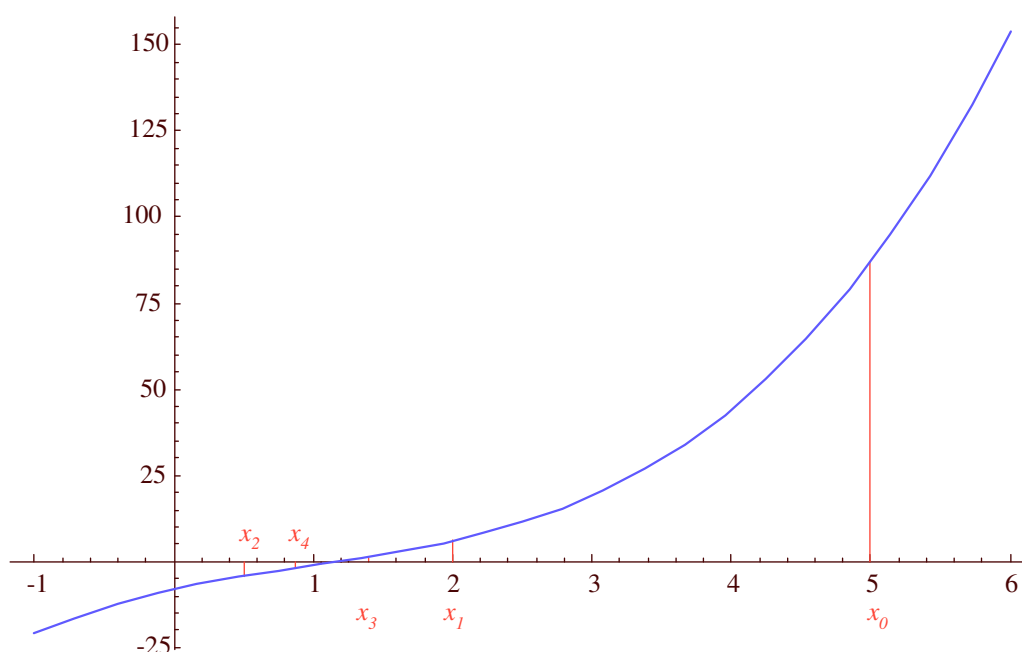


図 2: $f(x) = x^3 - 3x^2 + 9x - 8$ の実数解を 2 分法で解散し、その解の収束の様子を示している。初期値は $a = -1, b = 11$ として、最初の解 $c = x_0 = 5$ が求まり、順次より精度の良い x_1, x_2, x_3, \dots が求まる。それが、解析解 $x = 1.1659 \dots$ (x 軸との交点) に収束していく様子が分かる。

3.2 アルゴリズム

関数はあらかじめ、プログラム中に書くものとする。更に、計算を打ち切る条件もプログラム中に書くものとする。そうすると、図 3 のような 2 分法のフローチャートが考えられる。

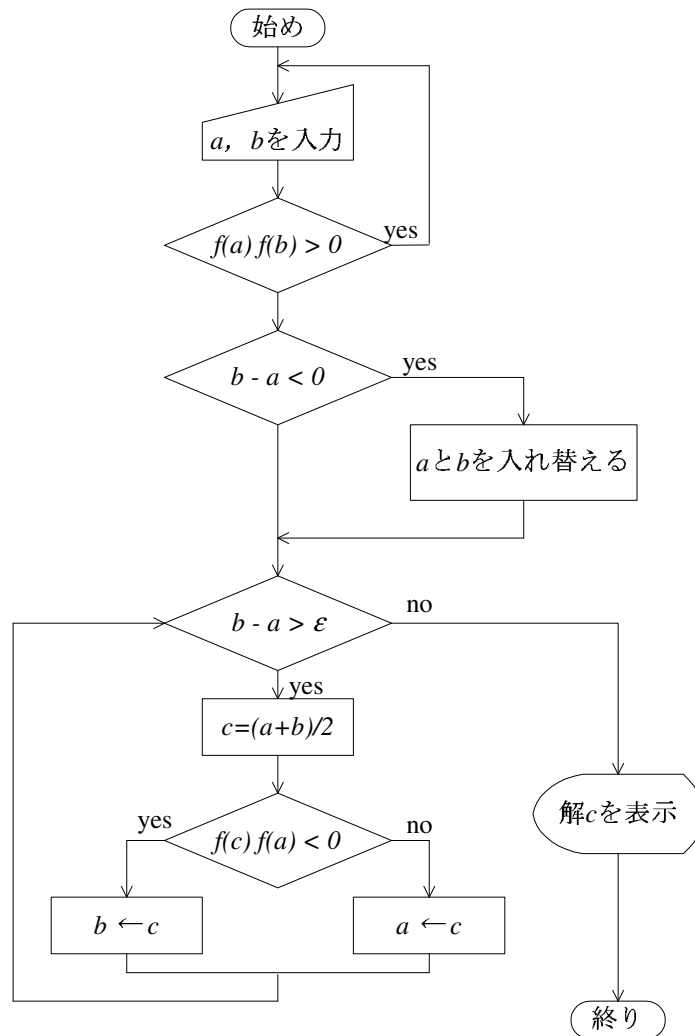


図 3: 2分法のフローチャート

4 ニュートン法 (Newton's method)

4.1 計算方法

関数 $f(x)$ のゼロ点 α に近い近似値 x_0 から出発する。そして、関数 $f(x)$ 上の点 $(x_0, f(x_0))$ での接線が、 x 軸と交わる点を次の近似解 x_1 とする。そして、次の接線が x 軸と交わる点を次の近似解 x_2 とする。同じことを繰り返して x_3, x_4, \dots を求める (図 4)。この計算結果の数列 $(x_0, x_2, x_3, x_4, \dots)$ は初期値 x_0 が適当であれば、真の解 α に収束する。

まずは、この数列の漸化式を求める。関数 $f(x)$ 上の点 $(x_i, f(x_i))$ の接線を引き、それと x 軸と交点 x_{i+1}

である。まずは、 x_{i+1} を求めることにする。点 $(x_i, f(x_i))$ を通り、傾きが $f'(x_i)$ の直線の方程式は、

$$y - f(x_i) = f'(x_i)(x - x_i) \quad (8)$$

である。 $y = 0$ の時の x の値が x_{i+1} にである。 x_{i+1} は、

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \quad (9)$$

となる。 x_i から x_{i+1} 計算できる。これをニュートン法の漸化式と言う。この漸化式を用いれば、次々と近似解を求めることができる。

計算の終了は、

$$\left| \frac{x_{i+1} - x_i}{x_i} \right| < \varepsilon \quad (10)$$

の条件を満たした場合とするのが一般的である。 ε は計算精度を決める定数で、非常に小さな値である。これ以外にも計算の終了を決めることは可能である。必要に応じて、決めればよい。実際に式 (2) を計算した結果を図 4 に示す。接線との交点が解に近づく様子がわかるであろう。

ニュートン法を使う上で必要な式は、式 (9) のみである。計算に必要な式は分かったが、数列がどのように真の解 α に収束するか考える。 x_{i+1} と真値 α の差の絶対値、ようするに誤差を計算する。 $f(\alpha) = 0$ を忘れないで、テイラー展開を用いて、計算を進めると

$$\begin{aligned} |\alpha - x_{i+1}| &= \left| \alpha - x_i + \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \right| \\ &= \left| \alpha - x_i + \frac{f(\alpha)}{f'(\alpha)} + \left[1 - \frac{f(\alpha)f''(\alpha)}{f'^2(\alpha)} \right] (x_i - \alpha) + O((\alpha - x_i)^2) \right| \\ &= |O((\alpha - x_i)^2)| \end{aligned} \quad (11)$$

となる。 $i + 1$ 番目の近似値は、 i 番目に比べて 2 乗で精度が良くなるのである。これを、二次収束と言い、非常に早く解に収束する。例えば、 10^{-3} の精度で近似解が得られているとすると、もう一回式 (9) を計算するだけで、 10^{-6} 程度の精度で近似解が得られるということである。一次収束の 2 分法よりも、収束が早いことが分かる。

ニュートン法の特徴をまとめると次のようになる。

長所 初期値が適当ならば、収束が非常に早い (図 8)。

短所 初期値が悪いと、収束しない (図 9)。収束しない場合があるので、反復回数の上限を決めておく必要がある。

ニュートン法は複素数にも適用できる。また、連立方程式にも容易に拡張できる。皆さんが学習してきた数は、整数 \rightarrow 自然数 \rightarrow 有理数 \rightarrow 無理数 \rightarrow 複素数 \rightarrow ベクトル \rightarrow 行列 $\rightarrow \dots$ と拡張されてきた。しかし、どのような数であれ演算規則は、非常に似ている。そのことから、実数で成り立つ方法は、複素数や行列にも成り立つことが予想できる。このことから、ニュートン法が連立方程式や複素数に拡張できるような気になる。ここでの学習は、これ以上踏み込まないことにするが、興味のある人は、各自、学習すべし。

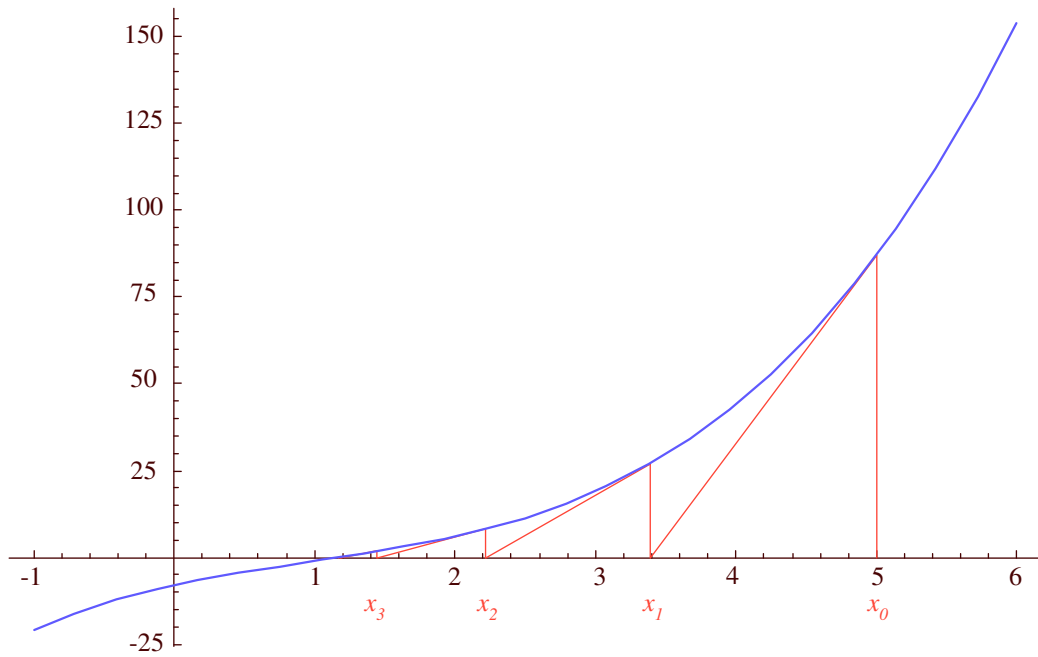


図 4: $f(x) = x^3 - 3x^2 + 9x - 8$ の実数解をニュートン法で計算し、解の収束の様子を示している。初期値 $x_0 = 5$ から始まり、接線と x 軸の交点からより精度の高い回を求めている。

4.2 アルゴリズム

2 分法同様、関数と計算を打ち切る条件はプログラム中に書くものとする。そうすると、図 5 のようなニュートン法のフローチャートが考えられる。

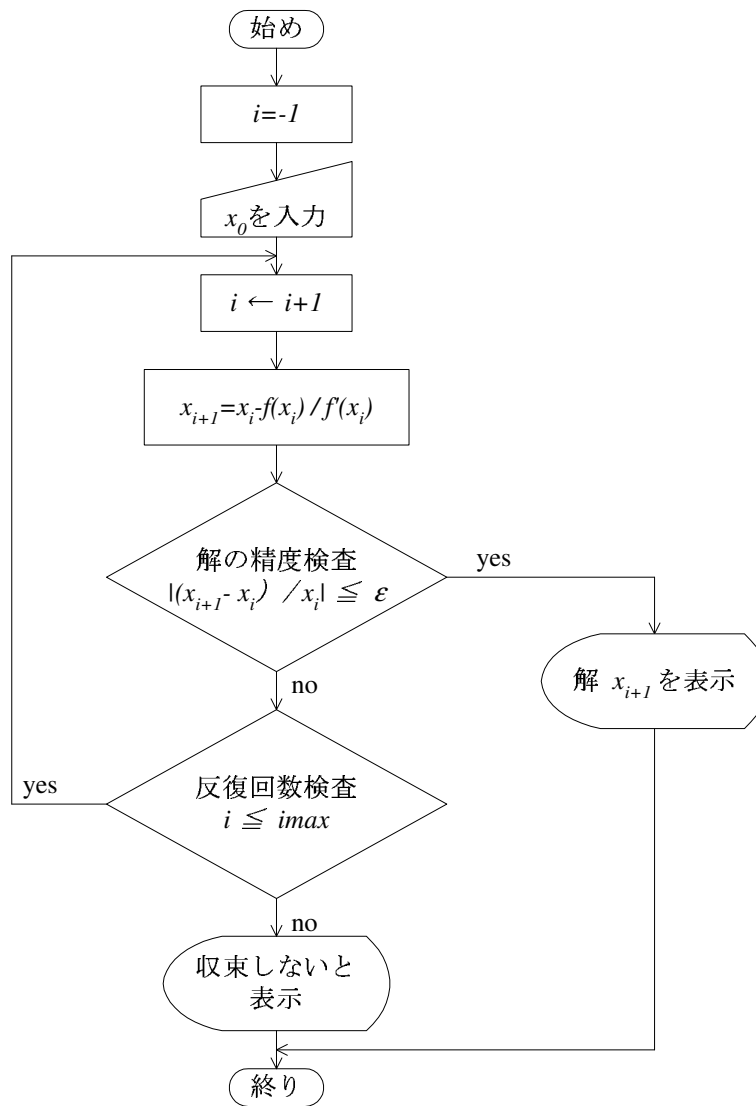


図 5: ニュートン法のフローチャート

5 はさみうち法

5.1 計算方法

2分法は収束が遅いので、それを少し改良した方法である。とはいっても、初期値が悪いと2分法よりも収束が遅いこともある。初期値が解に近ければ、収束は早くなる。2分法では c を $[a, b]$ の中点とした。その代わりに、2点 $(a, f(a))$ と $(b, f(b))$ を結ぶ直線が x 軸と交わる点を c とするのがはさみうち法である。

x 軸と交点 c は、

$$c = \frac{af(a) - bf(b)}{f(b) - f(a)} \quad (12)$$

となる。ゼロ点 α は常に区間 $[a, b]$ に存在する。次々に更新される c はゼロ点 α に収束するが、区間の幅 $|b - a|$ はゼロに収束しない。ある与えられた値 ε に対して、 $|f(c)| < \varepsilon$ となれば反復を停止させる。実際に式 (2) を計算した結果を図 6 に示す。交点が解に近づくことが理解できるはずである。

フロチャートは、各自考えよ。

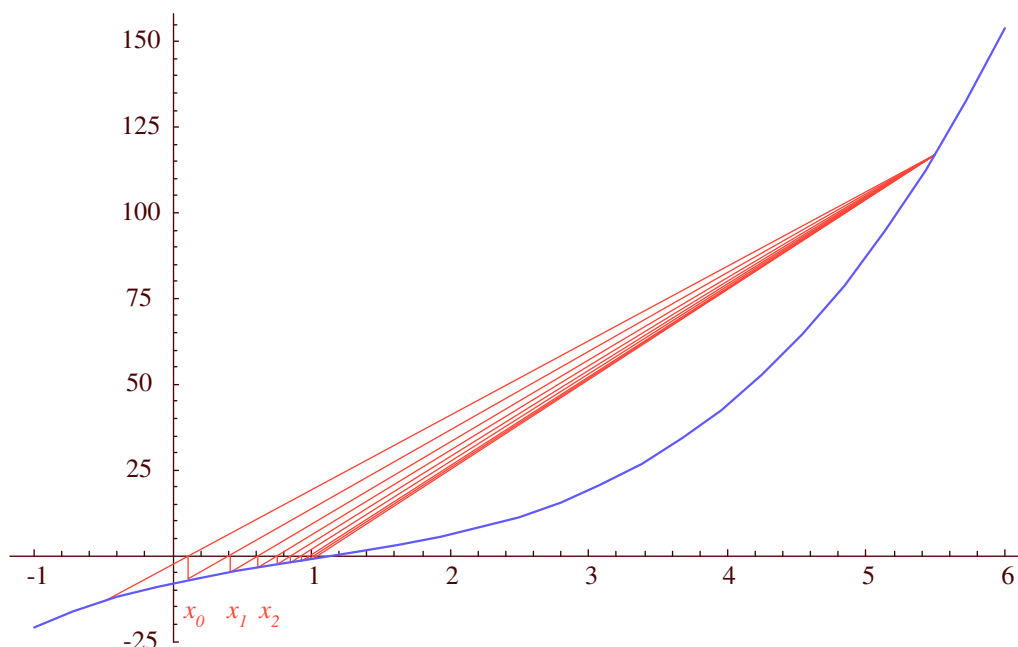


図 6: $f(x) = x^3 - 3x^2 + 9x - 8$ の実数解をはさみうち法で計算で、その解の収束の様子を示している。初期値 $a = -0.5, b = 5.5$ から出発している。x 軸との交点 $x_0, x_1, x_2, x_3 \dots$ が解析解 $x = 1.1659 \dots$ に収束していく様子が分かる。

6 割線法

6.1 計算方法

ニュートン法とよく似た方法である。ニュートン法の接線の代わりに、2点 $(x_{i-1}, f(x_{i-1}))$ と $(x_i, f(x_i))$ を結ぶ直線 (割線) を使う。この直線が x 軸と交わる点を、次の近似解 x_{i+1} とする。はさみうち法とは異なり、 $f(x_i)$ の符号は考慮しない。x 軸と交わる交点は、

$$x_{i+1} = x_i - f(x_i) \frac{x_i - x_{i-1}}{f(x_i) - f(x_{i-1})} \quad (13)$$

である。この式は、ニュートン法の漸化式 (9) とよく似ている。初期値 x_0, x_1 から始めて、漸化式 (13) を使って、次々に x_2, x_3, \dots を計算するのである。 $i \rightarrow \infty$ で、 $x_i \rightarrow \alpha$ に収束する。

ニュートン法では 1 回の反復当たり $f(x_i)$ と $f'(x_i)$ の 2 回の計算が必要なことに対して、割線法で新たに計算するのは、 $f(x_i)$ のみである。したがって、ニュートン法よりも計算の手間が省け、計算速度が速くなる。実際にこの方法で式 (2) を計算した結果を図 7 に示す。交点が解に近づくことが理解できるであろう。フロチャートは、各自考えよ。

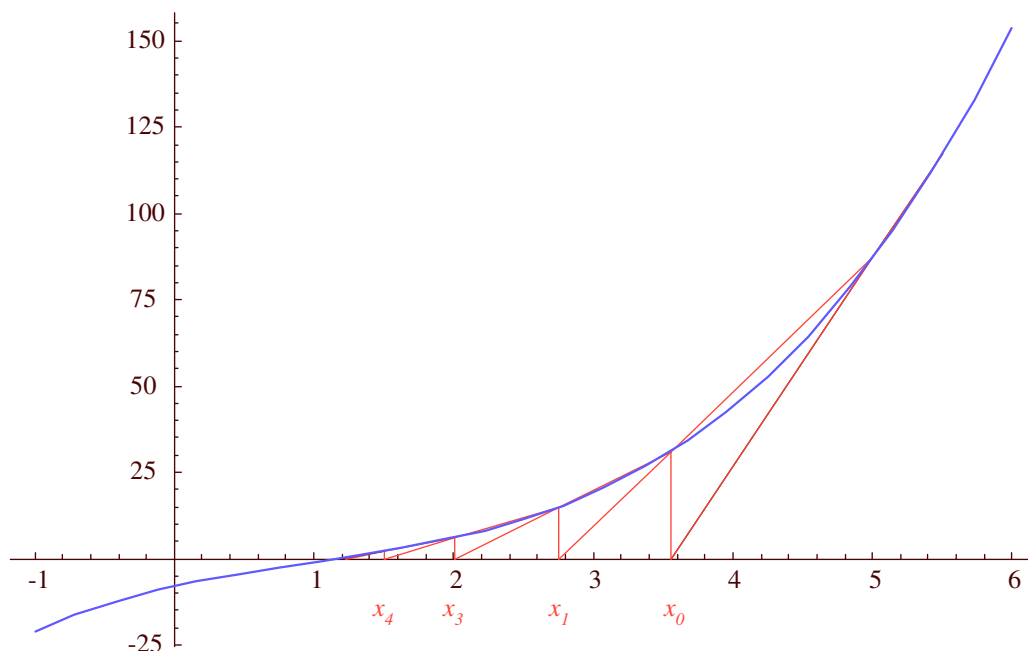


図 7: $f(x) = x^3 - 3x^2 + 9x - 8$ の実数解を割線法で計算し、その解の収束の様子を示している。初期値 $x_{-2} = 5.5, x_{-1} = 5.0$ から出発して、計算を進めている。x 軸との交点 $x_0, x_1, x_2, x_3, \dots$ が解析解 $x = 1.1659 \dots$ に収束していく様子が分かる。

7 それぞれの方法の比較

7.1 解への収束速度

図 8 に、これまでに示した 4 つの方法の解への近づき具合を示す。ニュートン法と割線法が収束が早いことが分かる。先に示した通り二次収束になっている。一方、二分法とはさみうち法は一次収束であることがグラフより分かる。二分法は、10 回の計算で、 $2^{-10} = 1/1024$ 程度になっていることに気づいてほしい。はさみうち法は、2 分法を改良したにもかかわらず、それよりも収束の速度が遅くなっている。これは、初期値が悪いため、それを改善すれば、2 分法よりも早く収束するはずである。

ニュートン法や割線法は収束が早く良さそうであるが、次に示すように解へ収束しない場合があり問題を含んでいる。問題に応じて、計算方法を使い分けるべきである。

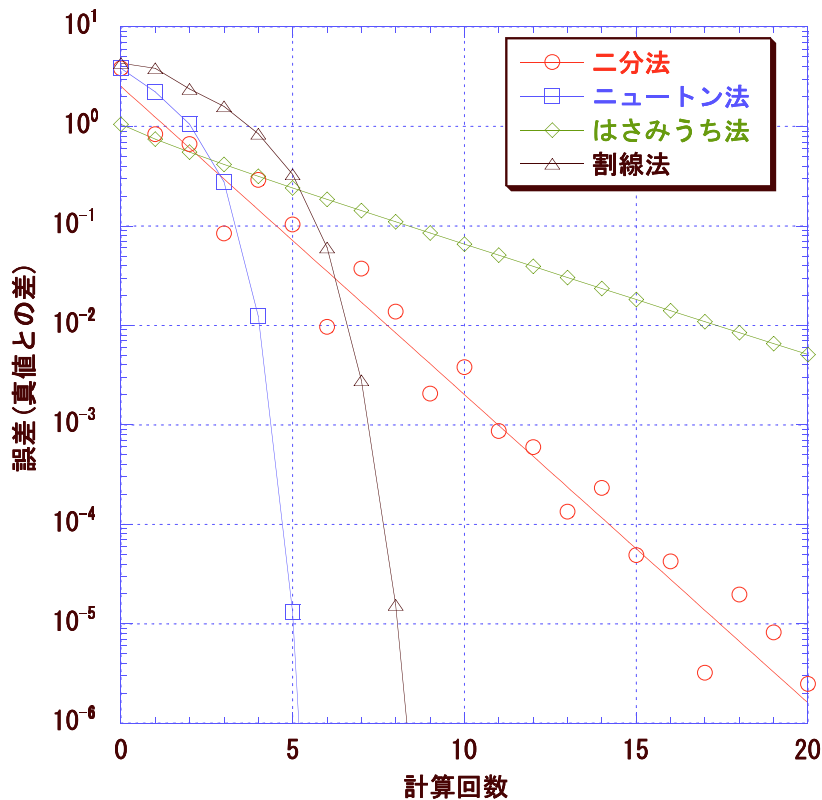


図 8: 計算回数 (反復回数) と誤差の関係

7.2 ニュートン法の問題点

アルゴリズムから、二分法とはさみうち法は解に必ず収束する²。これらの方法は、収束のスピードが遅いのが欠点である。一方、ニュートン法と割線法は収束するとは限らない。初期条件に依存する場合がある。厳密にその条件を求めるのは大変なので、初期条件により収束しない実例を示すことにする。

非線形方程式

$$3 \tan^{-1}(x - 1) + \frac{x}{4} = 0 \quad (14)$$

を計算することを考える。これは、初期値のより、収束しない場合がある。例えば初期値 $x_0 = 3$ の場合、図 9 のように収束しない³。これを初期値 $x_0 = 2.5$ にすると図 10 のように収束する。

このようにニュートン法は解に収束しないで、振動する場合がある。こうなると、プログラムは無限ループに入り、永遠に計算し続ける。これは資源の無駄遣いなので、慎むべきである。通常は、反復回数の上限を決めて、それを防ぐ。ニュートン法を使う場合は、この反復回数の上限は必須である。

²収束すると私は信じています。厳密な証明は数学者に任せましょう。

³発散だと思う。もしかしたら振動かも。私は興味がありませんので、発散か振動か誰か証明してください。

ニュートン法で収束する必要条件が分かればこの問題は解決する。しかし、それを探するのは大変である。というか私には分からない。一方、十分条件は簡単にわかる。閉区間 $[a, b]$ で、 $f(a) < 0, f(b) > 0$ のような関数を考える。このとき、

- 常に $f'(x) > 0, f''(x) > 0$ で、初期値が $x_0 = b$ の場合
- 常に $f'(x) > 0, f''(x) < 0$ で、初期値が $x_0 = b$ の場合

は、必ず収束する。ニュートン法の図から明らかである。 $f(a) > 0, f(b) < 0$ の場合は、 $f(x)$ に-1倍すれば、先の十分条件を考えることができる。

実際には収束しない場合のほうが稀であるので、ニュートン法は非常に強力な非線型方程式の解法である。ただ、反復回数を忘れないことが重要である。また、二分法と組み合わせて使うことも考えられる。

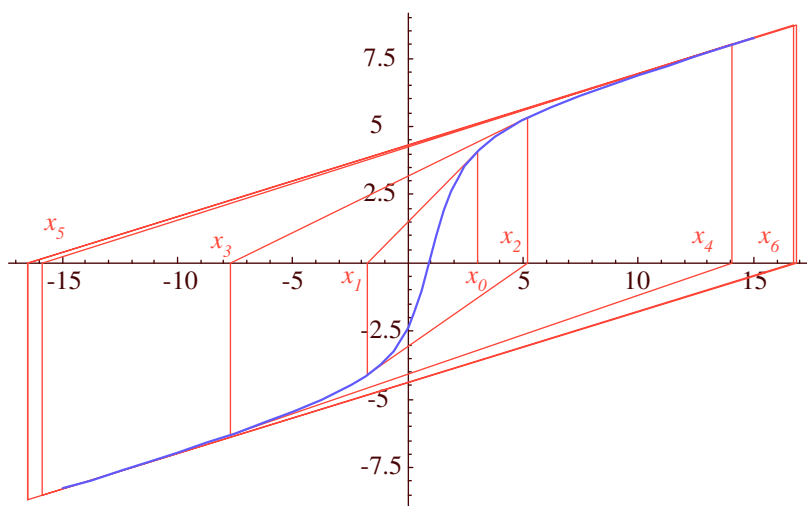


図 9: ニュートン法で解が求まらない場合

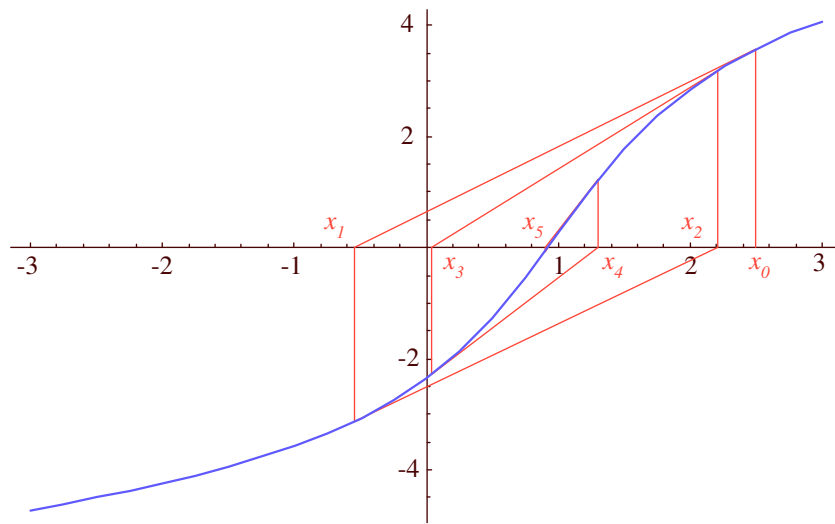


図 10: ニュートン法で解が求まる場合

8 課題

以下の課題を与える。

- | | |
|------|--------------------------------------|
| 内容 | 式 (2) の実数解を求める二分法とニュートン法のプログラムを作成せよ。 |
| 期限 | 次回のこの授業まで |
| 提出方法 | レポートとして提出 |
| その他 | 次回の授業では、課題のプログラムを実際に動作させる。 |

分からなくても、自分でプログラムを書く努力をすることが重要である。プログラムは、図 3 や 5 のフローチャート通りに書けば良い。