電子計算機 **5E**

5E　2003.7.17

非線形方程式の数値計算法

学習内容(目次)

秋田工業高等専門学校　電気工学科　山本昌志

授業のテーマ

本日の授業のテーマは、非線型方程式の数値解法です。以下の数値計算テクニックについて、学習します。(1)と(2)は教科書にかかれている方法ですが、(3)と(4)は書かれていません。この 4 つ方法については、頭の中にイメージが沸くようにしてください。

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

授業のゴール

- 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。

1. 概要

数値計算により方程式の解を求める方法を学習します。次のような、方程式

$$f(x)=0 \tag{1}$$

の x の値を計算します。解くべき方程式の右辺がゼロでない場合は、左辺へ移項して(1)式の形にします。

ここでは、教科書の問題

$$x^3-3x^2+9x-8=0 \tag{2}$$

をいろいろな方法で計算します。ちなみに、この方程式の理論解は、

$$\begin{aligned}
x_1 &= 1-2\left(\frac{2}{1+\sqrt{33}}\right)^{1/3}+\left(\frac{1}{2}\left(1+\sqrt{33}\right)\right)^{1/3} \\
x_2 &= 1+\left(1+i\sqrt{3}\right)\left(\frac{2}{1+\sqrt{33}}\right)^{1/3}+\frac{1}{2}i\left(i+\sqrt{3}\right)\left(\frac{1}{2}\left(1+\sqrt{33}\right)\right)^{1/3} \\
x_3 &= 1+\left(1-i\sqrt{3}\right)\left(\frac{2}{1+\sqrt{33}}\right)^{1/3}-\frac{1}{2}i\left(1+i\sqrt{3}\right)\left(\frac{1}{2}\left(1+\sqrt{33}\right)\right)^{1/3}
\end{aligned} \tag{3}$$

です。ここで示す数値計算法により、複素数の解を求めることも可能ですが、少し難しくなります。とりあえず、実数解を求めることにしましょう。ここで、(3)式の実数解の近似値をあらかじめ求めておきます。実数解は、

$$x_1 = 1.16590558412221 \tag{4}$$

となります。この実数解をいろいろな方法で求めてみましょう。

言うまでもないですが、(2)式は 3 次方程式ですが、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りません。計算に用いれる領域が連続であれば、どんな関数系でも解けます。三角関数や指数関数、分数の形でも関係なく解けます。

ここでは、次の 4 通りの方法をしめします。

(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)

いずれの方法も、$y = f(x)$の x 軸と交わる点、即ち $f(x)=0$ となる点 x を初期値を決めて、反復(ループ)計算を用いて探します[1]。(2)式であれば、 $f(x) = x^3-3x^2+9x-8$ として計算します。この関数の形は、図 1 のようになります。4 通りの方法で、図 1 の x 軸との交点を計算します。

[1] 実数の場合のイメージです。複素数や行列になると少しイメージが変わりますが、拡張はできます。

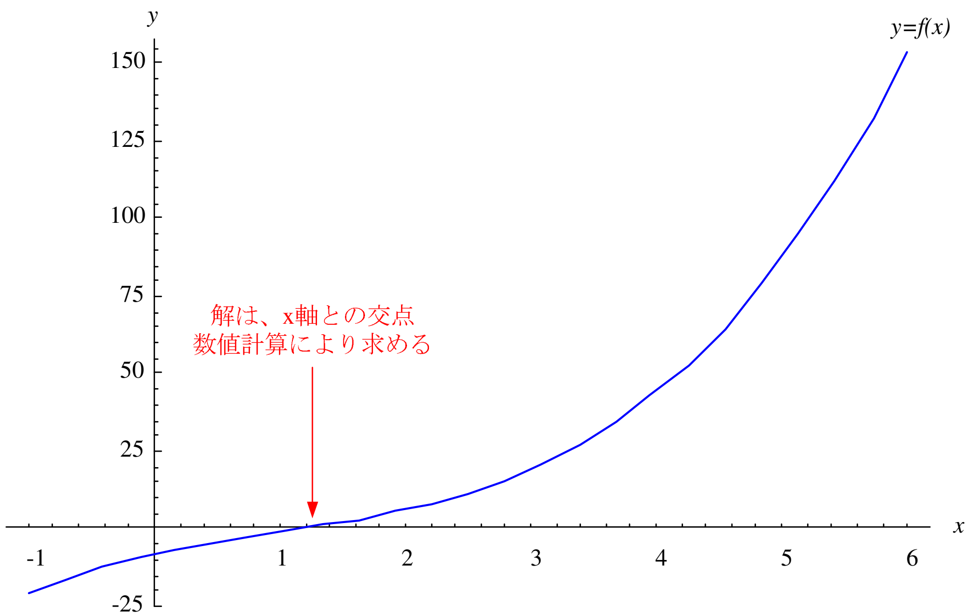

図 1 関数の形と解の座標

2. 二分法

2.1 計算方法

この方法のイメージは、教科書に書いてある通りです。閉区間 $[a, b]$で連続な関数 $f(x)$の値が、

$$f(a)f(b) < 0 \tag{5}$$

ならば、$f(\alpha)=0$ となるαが区間$[a, b]$にあります。これは、中間値の定理から保証されます。

実際の数値計算は、$f(a)f(b)<0$ であるような 2 点 a, b ($a<b$)から出発します。そして、区間$[a, b]$を 2 分する点 $c=(a+b)/2$ にたいして、$f(c)$を計算を行います。$f(c)f(a)<0$ ならば b を c と置き換え、$f(c)f(a)>0$ ならば a を c と置き換えます。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、計算を終了します。収束は収束率 1/2 の一次収束です。

実際にこの方法で(1)式を計算した結果を図 2 に示します。$f(a)$と $f(b)$の符号を見ながら、(5)式を満たす区間 $[a, b]$を 1/2 ずつ縮小していく様子がわかると思います。

この方法の長所と短所は、以下の通りです。

長所

閉区間 $[a, b]$の間に解があるならば、必ず解に収束します。間違いなく解を探すので、ロバスト(robust : 強靭な)な解法といわれます。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します。

さらに、解の精度が分かります。解の誤差は、区間の幅 $|b-a|$以下です。

短所

収束が遅い(図 8)。

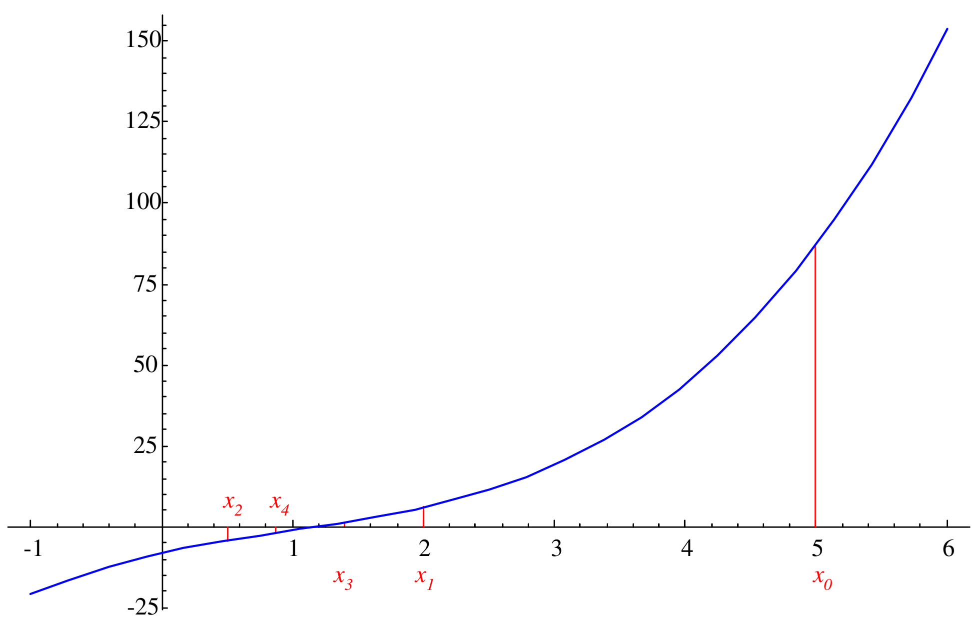

図 2 2 分法の解の収束の様子。初期値は a=-1, b=11 として、最初の解 $c=x_0$=5 が求まり、x_1, x_2, x_3・・・と解析解 x=1.1659(x 軸との交点)に収束していく様子が分かる。

2.2 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します。更に、計算を打ち切る条件もプログラム中に書くものとします。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ます。

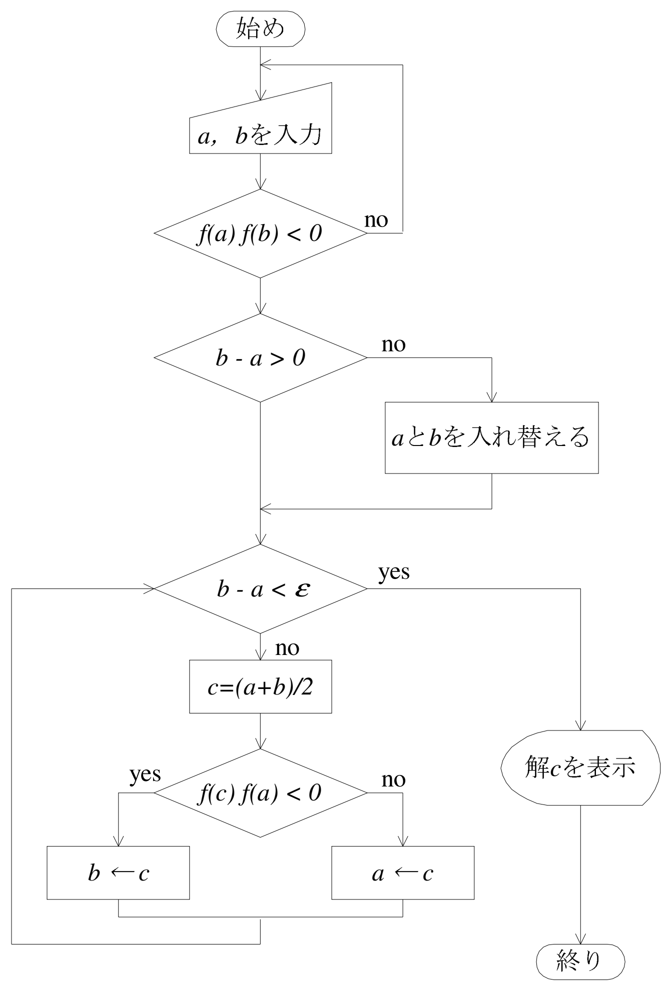

図 3 2 分法のフローチャート

3. ニュートン法

3.1 計算方法

関数 $f(x)$のゼロ点αに近い近似値 x_0 から出発します。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 とします。そして、次の接線が x 軸と交わる点を次の近似解 x_2 とします。同様に x_3, x_4, ・・・を計算します(図 4)。この計算結果の数列は、(x_0, x_2, x_3, x_4, ・・・)は初期値 x_0 が適当であれば、真の解αに収束します。

それでは、この数列の漸化式を求めましょう。関数 $f(x)$上の点(x_i , $f(x_i)$)の接線を引き、それと x 軸と交点が点 x_{i+1} となります。x_{i+1} を求めましょう。点(x_i , $f(x_i)$)を通り、傾きが $f'(x_i)$の直線の方程式は、

$$y - f(x_i) = f'(x_i)(x - x_i) \tag{5}$$

です。$y = 0$ の時の x の値が x_{i+1} になります。x_{i+1} は、

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \tag{6}$$

です。x_{i+1} が、x_i から計算できます。これをニュートン法の漸化式といいます。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ます。

計算の終了は、

$$\left| \frac{x_{i+1} - x_i}{x_i} \right| < \varepsilon \tag{7}$$

の条件を満たした場合です。ε は計算精度を決める定数で、非常に小さな値です。これ以外にも計算の終了を決めることもできます。

実際にこの方法で(1)式を計算した結果を図 4 に示します。接線との交点が解に近づく様子がわかると思います。

ニュートン法を使う上で必要な式は、(6)式のみです。計算に必要な式は分かったのですが、数列がどのように真の解αに収束するか考えてみましょう。x_{i+1} と真値αの差の絶対値、ようするに誤差を考えます。$f(\alpha)=0$ を忘れないで、テイラー展開を用いて、計算を進めると

$$\begin{aligned}
|\alpha - x_{i+1}| &= \left| \alpha - x_i + \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \right| \\
&= \left| \alpha - x_i + \frac{f(\alpha)}{f'(\alpha)} + \left(1 - \frac{f(\alpha)}{f''(\alpha)} \right)(x_i - \alpha) + O\left((\alpha - x_i)^2\right) \right| \qquad (8) \\
&= O\left(|\alpha - x_i|^2\right)
\end{aligned}$$

となります。$i+1$ 番目の近似値は、i 番目に比べて 2 乗で精度が良くなっています。これを、二次収束と言い、非常に早く解に収束することが分かります。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(6)を計算するだけで、10^{-6} の程度の精度で近似解が得られるということです。一次収束の 2 分法よりも、収束が早いことが理解できるでしょう。

ニュートン法の特徴をまとめておきます。

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ります。

ニュートン法は複素数にも適用できます[2]。また、連立方程式にも容易に拡張できます。皆さんが学習してきた数は、

整数 → 自然数 → 有理数 → 無理数 → 複素数 → ベクトル → 行列 →・・・

と拡張されてきました。しかし、どのような数であれ演算規則は、非常に似ています。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されます。このことからも、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ります。ここでの学習は、これ以上踏み込まないことにします。興味のある人は、各自、学習してください。

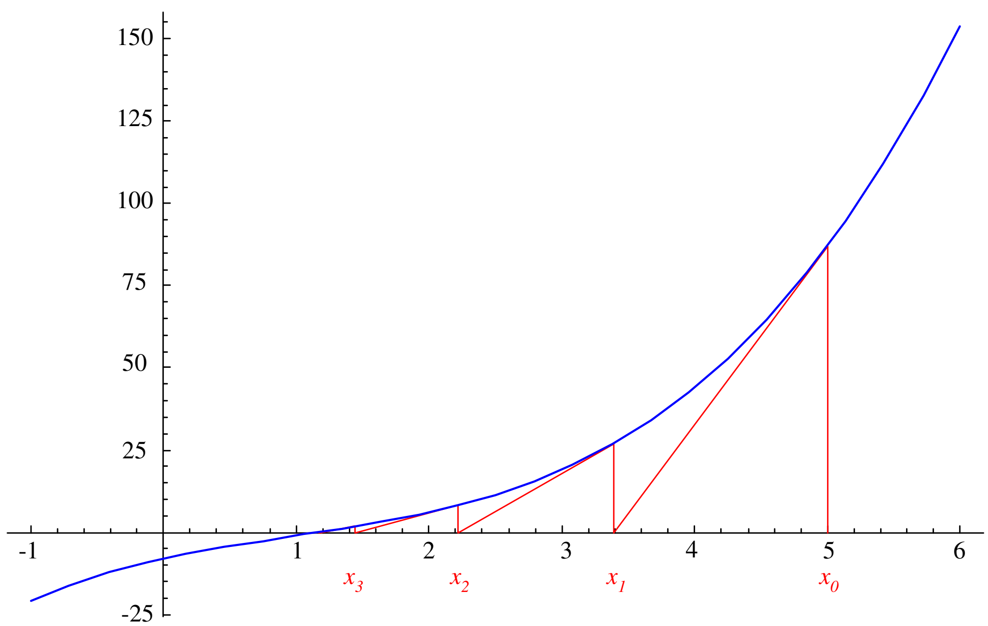

図 4 ニュートン法の解の収束の様子。初期値 x_0=5 から始まり、接線と x 軸の交点から順次、解に近づいている様子がわかります。

[2] 2 分法も複素数に適用できるでしょう。

3.2 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します。そうすると、図 5 のような 2 分法のフローチャートが考えられます。

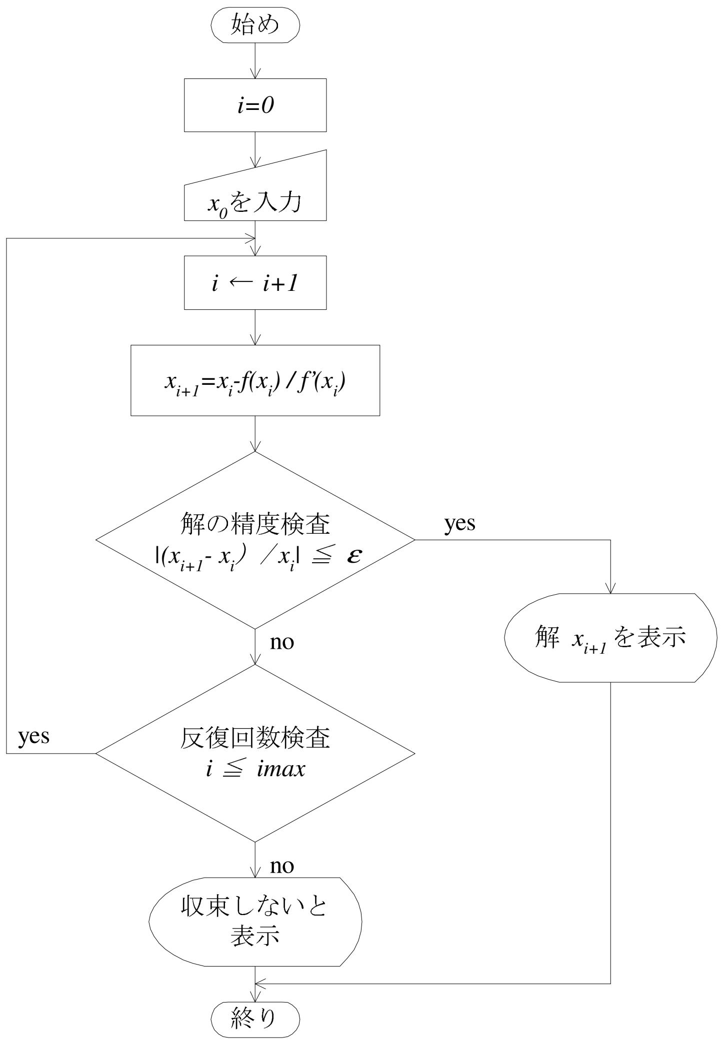

図 5 ニュートン法のフローチャート

4. はさみうち法

4.1 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す。とはいっても、初期値が悪い、解から離れていると 2 分法よりも収束が遅いです。初期値が解に近ければ、収束は早くなります。

2 分法では c を[a, b]の中点としました。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 とします。x 軸と交点 c は、

$$c = \frac{af(a) - bf(b)}{f(b) - f(a)} \tag{9}$$

となります。ゼロ点αは常に区間[a, b]の中に存在しますが、区間の幅 $|b-a|$ はゼロに収束しません。次々に更新される c はゼロ点αに収束します。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します。

実際にこの方法で(1)式を計算した結果を図 6 に示します。交点が解に近づく様子がわかると思います。

フロチャートは、各自考えよ。

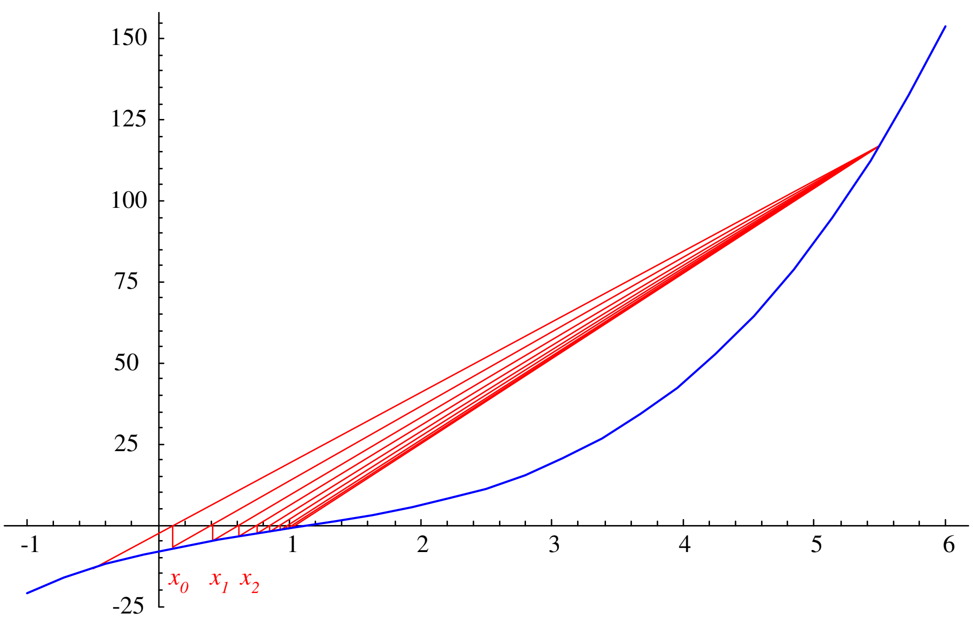

図 6 はさみうち法の解の収束の様子。初期値は a=-0.5, b=5.5 として計算を進めている。x 軸との交点 x_0, x_1, x_2, x_3・・・が解析解 x=1.1659 に収束していく様子が分かる。

5. 割線法

5.1 計算方法

ニュートン法とよく似ています。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)を使います。この直線が x 軸と交わる点を、次の近似解 x_{i+1} とします。はさみうち法とは異なり、$f(x_i)$の符号は考慮しません。x 軸と交わる交点は、

$$x_{i+1} = x_i - f(x_i)\frac{x_i - x_{i-1}}{f(x_i) - f(x_{i-1})} \tag{10}$$

です。この式は、ニュートン法の漸化式(6)とよく似ていることが分かるでしょう。この漸化式と初期値 x_0, x_1 によって、次々に $x_2, x_3,$ ・・・を計算します。$i\rightarrow\infty$で、$x_i \rightarrow \alpha$に収束します。

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 回の計算が必要であるのに対して、割線法では新たに計算するのは、$f(x_i)$の計算のみです。したがって、ニュートン法よりも計算の手間が省け、計算速度が速くなります。

実際にこの方法で(1)式を計算した結果を図 7 に示します。交点が解に近づく様子がわかると思います。

フロチャートは、各自考えよ。

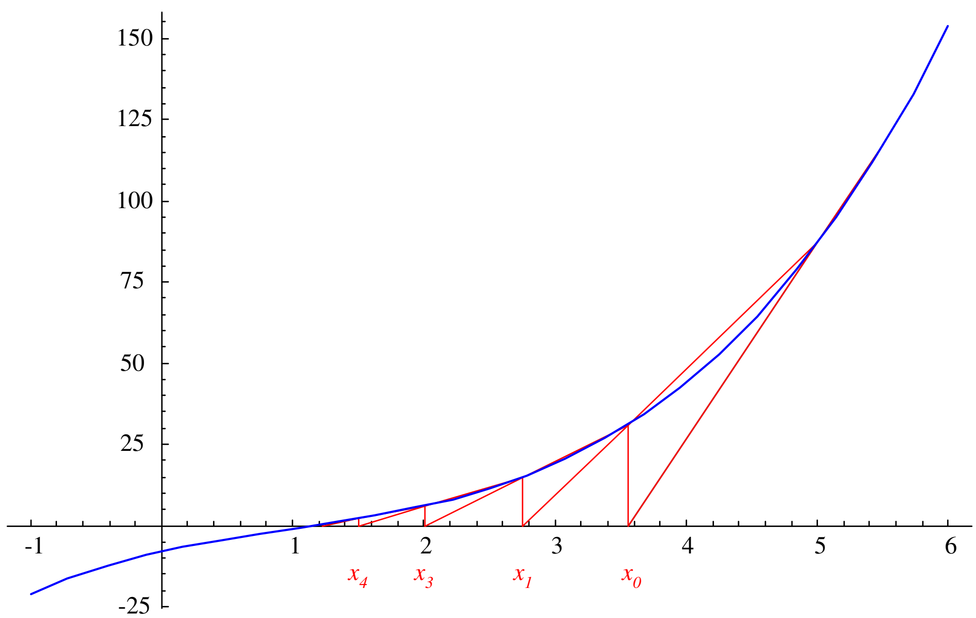

図 7 割線法の解の収束の様子。初期値は x_{-2}=5.5, x_{-1}=5.0 として計算を進めている。x 軸との交点 x_0, x_1, x_2, x_3・・・が解析解 x=1.1659 に収束していく様子が分かる。

6. それぞれの方法の比較

6.1 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します。ニュートン法と割線法が収束が早いのが分かります。先に示した通り二次収束になっています。一方、ニュートン法とはさみうち法は一次収束であることが伺えます。二分法は、10 回の計算で、$2^{-10} = 1/1024$ 程度になっていることが良くわかります。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ます。これは、初期値が悪いためです。初期値をもう少し良くすれば、2 分法よりも早く収束します。

ニュートン法や割線法は収束が早く良さそうですが、次に示すように解へ収束しない場合があります。問題に応じて、計算方法を使い分けるべきでしょう。

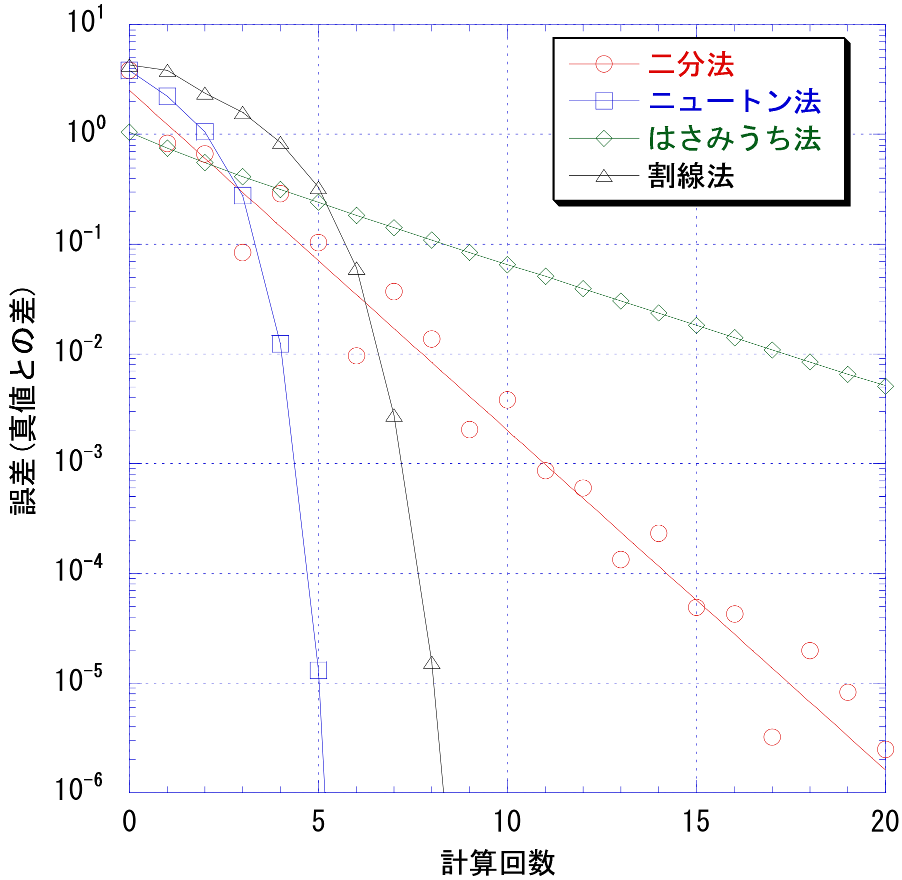

図 8 計算回数(反復回数)と誤差の関係。

6.2 収束しない場合

アルゴリズムから、2 分法とはさみうち法は解に必ず収束します[3]。これらの方法は、収束のスピードが遅いのが欠点です。一方、ニュートン法と割線法は収束するとは限りません。初期条件に依存する場合があります。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します。

次の非線形方程式を計算することを考えます。

$$3\tan^{-1}(x-1)+\frac{x}{4}=0 \tag{11}$$

これは、初期値のより、収束しない場合があります。例えば初期値 x_0=3 の場合、図 9 のように収束しません[4]。これを初期値 x_0=2.5 にすると図 10 のように収束します。

ニュートン法で収束する必要条件を示すのは大変です。というか私には分かりません。一方、十分条件は簡単です。教科書に書いてある通りです。

- 閉区間[a, b]で、$f(a)<0, f(b)>0$ で、常に $f'(x)>0, f''(x)>0$ の場合、初期値を $x_0=b$ とした場合。

- 閉区間[a, b]で、$f(a)<0, f(b)<0$ で、常に $f'(x)>0, f''(x)<0$ の場合、初期値を $x_0=a$ とした場合。

これらの場合は、必ず収束します。ニュートン法の図から明らかですよね。$f(a)>0$, $f(b)<0$ 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ます。

[3] 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。

[4] 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。

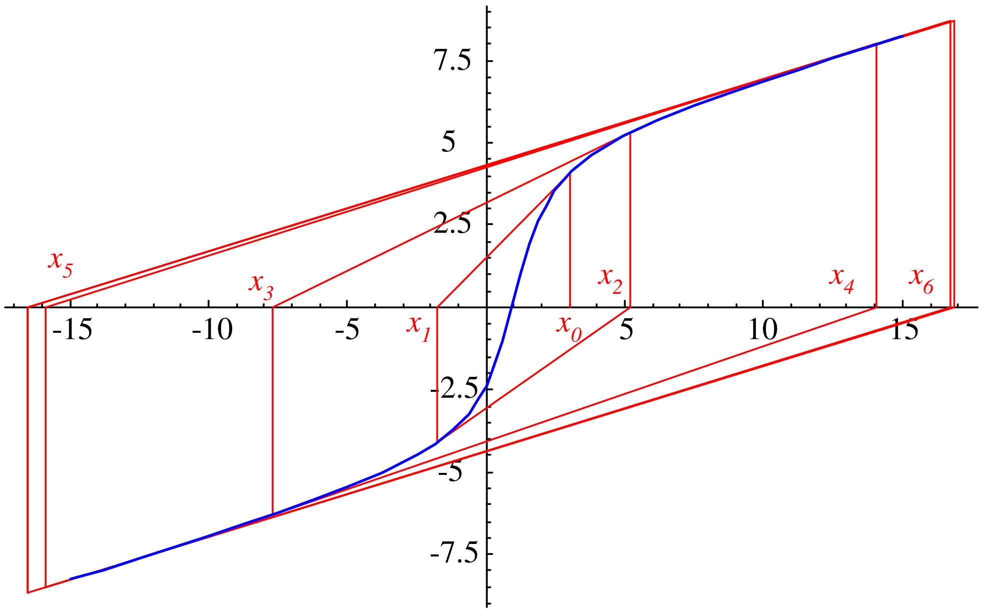

図 9 ニュートン法で解が発散する場合。

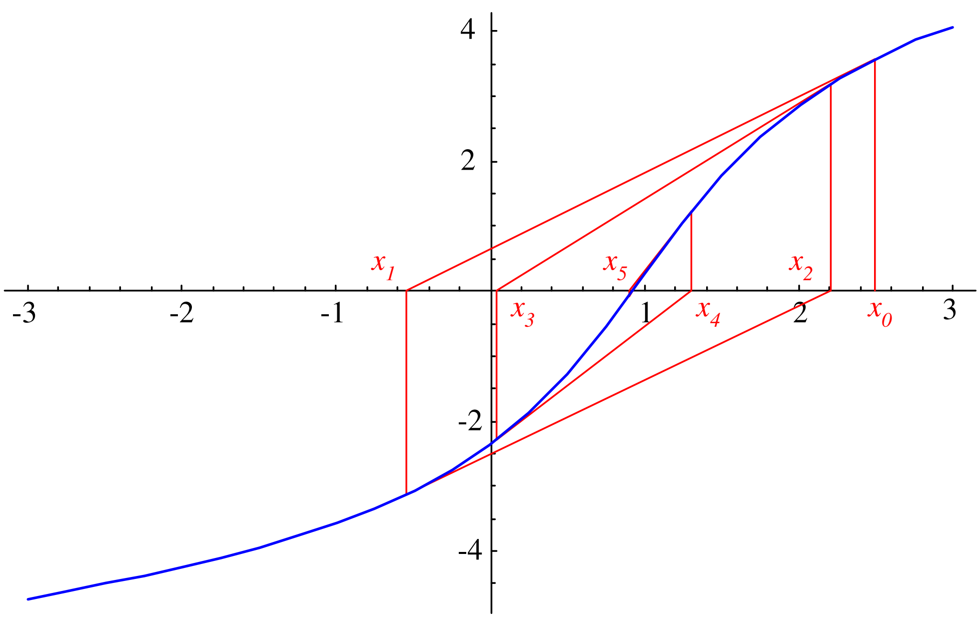

図 10 ニュートン法で解が収束する場合