

工学基礎実験実習

レポート文書作成技術 第2回レポート

— ニュートン法に関する実験 —

氏名: 重近 大智 (SHIGECHIKA, Daichi)

学生番号: 09501527

出題日: 2019年6月4日

提出日: 2019年6月4日

締切日: 2019年6月11日

目次

1	はじめに	1
2	ニュートン法の原理	1
3	実験	2
4	まとめ	3
5	修正点	4

1 はじめに

方程式の求解は、科学技術計算において頻繁に現れる。解の公式が存在する方程式では、有限回の四則演算と初等関数によって解を計算できるが、一般の方程式の解を解析的に表す公式は存在しない。このような場合は、解の近似値を計算する数値解法が有用である。ニュートン法 [1, 3] は代表的な数値解法である。多くの場合、ニュートン法は2次の収束を示すため、効率良く解を得ることができる。ただし、ニュートン法は初期値として解の粗い近似値を与える必要があり、初期値が適切でない場合、収束までに多くの反復を要したり、収束しない場合もある。また、計算しようとしている解が重解である場合は、収束が遅くなる。ニュートン法の使用に際しては、このような欠点に留意する必要がある。以下では、ニュートン法の挙動を理論的に解析し、 $f(x) = (x-1)(x+1)^2 = 0$ を対象として、ニュートン法の性質を調べる実験を行う。

2 ニュートン法の原理

方程式 $f(x) = 0$ の解とは、関数 $f(x^*) = 0$ を満たす x^* のことを言う。図2では、曲線 $y = f(x)$ と x 軸が交わっており、この交点の座標が x^* である。

```

$ python3.6
>>> x=1.1
>>> x=x-(x-1)*(x+1)*(x+1)/(3*x*x+2*x-1);x
1.008695652173913
>>> x=x-(x-1)*(x+1)*(x+1)/(3*x*x+2*x-1);x
1.0000746407911925
>>> x=x-(x-1)*(x+1)*(x+1)/(3*x*x+2*x-1);x
1.000000005570624
>>> x=x-(x-1)*(x+1)*(x+1)/(3*x*x+2*x-1);x
1.0
>>> x=x-(x-1)*(x+1)*(x+1)/(3*x*x+2*x-1);x
1.0

```

図 1: 実験結果 1

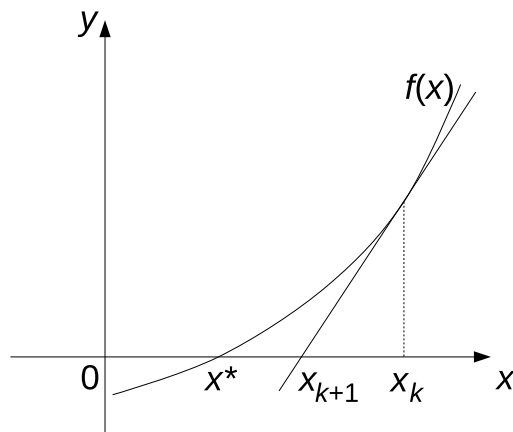


図 2: ニュートン法の幾何学的解釈

いま、解 x^* の近似値 x_k が与えられているとする。点 $(x_k, f(x_k))$ における曲線 $y = f(x)$ の接線（図中の斜めの線）の方程式は $y = f(x_k) + (x - x_k) \cdot f'(x_k)$ である。ここで、 $f'(x)$ は $f(x)$ の導関数である。この接線と x 軸の交点 (x_{k+1}) は次の式で表される [2, 3]。

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \quad (1)$$

図 2 の場合、 x_{k+1} が x_k よりも解 x^* に近い。このため、適当な初期値 x_0 を与え、式 1 によって数列 (x_k) を定義すると、この数列は $k \rightarrow \infty$ で x^* に収束することが期待される。

収束性の議論を厳密にするために、極限值 x^* との誤差 r_k を次のように定義する。

$$r_k := x_k - x^* \quad (2)$$

式 1 の関数 $f(x)$ を x^* の近傍でテイラー展開して、整理すると次式が得られる [1]。

$$r_{k+1} = r_k - \frac{r_k f' + r_k^2 f''/2 + \dots}{f' + r_k f'' + \dots} \bigg|_{x=x^*} = (r_k^2/2)(f''/f') \big|_{x=x^*} + O(r_k^3) \quad (3)$$

ただし、 $f'(x_k) \neq 0$ と仮定した。上の式は r_{k+1} が r_k^2 に比例することを示している。これを 2 次収束という。これは、 r_k が十分に小さければ、式 (1) の適用によって、正しい桁数がほぼ 2 倍になることを示している。逆に、 r_k が大きいときや $f'(x_k)$ が 0 に近いときには発散する場合がある。また、 $f'(x_k) = 0$ のときは x_{k+1} が計算できない。

なお、重解の場合 ($f'(x^*) = 0$ の場合) は 1 次収束である。また、解付近で 2 次導関数が 0 になる場合には 3 次の収束を示す。

3 実験

ここでは、次の方程式 (図 3) にニュートン法を適用して、挙動を調べる。

$$f(x) = (x - 1)(x + 1)^2 \quad (4)$$

解は、1, -1, 1 である。導関数は $3x^2 + 2x - 1$ であるからニュートン法の反復式は次のようになる。

$$x_{k+1} = x_k - (x_k - 1)(x_k + 1)^2 / (3x_k^2 + 2x_k - 1) \quad (5)$$

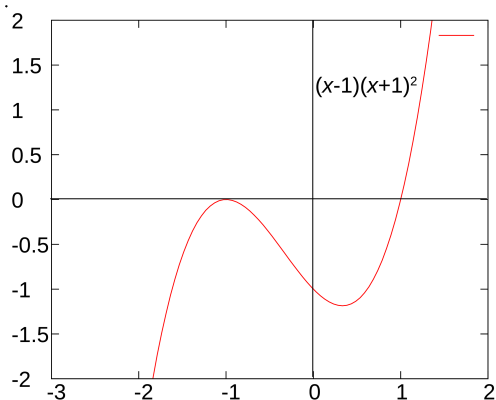


図 3: $(x-1)(x+1)^2$ のグラフ

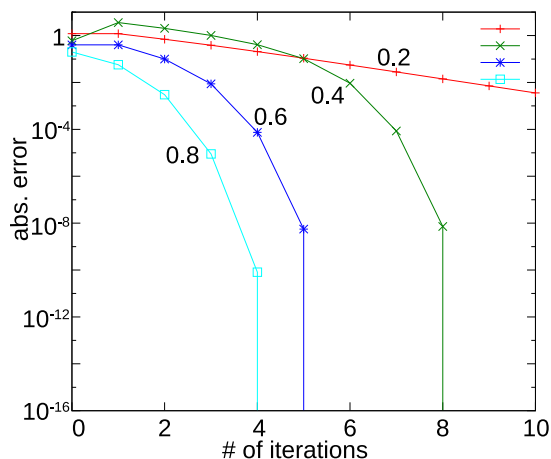


図 4: 反復回数と誤差の関係

表 1: 様々な初期値からのニュートン法の反復結果

初期値	10 回の反復後の値
-0.2	- 0.99964988198316793008
0	N/A
0.2	- 1.00357177068625731955
0.4	1.00000000000000000001
0.6	1.00000000000000000001
0.8	1.00000000000000000001

初期値を 1.1 とし、bc コマンドを用いてニュートン法の反復を行った結果を図 1 に示す。5 回の反復で約 20 桁まで正しく得られていることがわかる。初期値が 10 の場合には 11 回の反復を要した。

初期値を -2 とすると重解の -1 に近づく。しかし、10 反復後の x_{10} が $-1.0014\dots$ であり、2 桁程度しか正しくない。20 桁程度の精度に達するには数十回の反復を要すると考えられる。しかし、実際には 30 数回目以降は桁落ちのため正しく計算されなかった。

表 1 に、様々な初期値からニュートン法の反復を 10 回行った後の値を示す。 $f'(x) = 0$ となるのは $x = -1, 1/3$ であるため、 x_k が -1 または $1/3$ となってはならない。概ね、初期値が $1/3$ を越える場合は 1 に収束すると考えられる。また、この場合は 2 次収束なので、10 回以内の反復で収束している。一方、初期値が $1/3$ より小さい場合には、重解 -1 に向かうが、1 次収束であるため 10 回の反復では 2 桁程度の精度しか得られない。初期値が 0 の場合は次に $x_1 = -1$ となり、それ以上計算できないため N/A (not available) と表示している。

図 4 に、様々な初期値に対する誤差 r_k の絶対値の推移を対数目盛を示す。各折れ線付近の数字は初期値を表す。bc の性質上、最後の値は 10^{-20} の誤差を含んでいるため、折れ線の一番右側が正しくない形に曲がっているが、初期値が 0.4 以上の場合（解 1 に 2 次収束する場合）は、ほぼ同じ形状で急速に誤差が減少していることが分かる。一方、初期値が 0.2 の場合（解 -1 に 1 次収束する場合）は、直線を描いており、この直線が 10^{-20} に達するには非常に時間が掛かることが用意に予想できる。上記の初期値では誤差は単調に減少しているが、一般には誤差が増加することもあり得る。 x_k が $1/3$ 付近または -1 付近の値をとる場合には、 $f'(x_k)$ が 0 に近いため x_{k+1} が非常に大きな値となり、誤差が増大する。このため、ニュートン法の初期値 x_k がこのような際どい領域を通過しないように選ぶ必要がある。

4 まとめ

ここでは、簡単な方程式にニュートン法を適用し、解と極限値の関係を調べた。また、挙動の理論的解析を行った。

実際の応用では、解のわからない難しい方程式を解く必要がある。このような問題については、今後の更なる検討を要する。

5 修正点

- 目次を追加した。
- 段落の初めの空き文字数が2文字になっていたのを1文字に修正した。
- table や figure で [h] を使用していたのをなくした。
- 表のキャプションを表の上側に移動した。
- 図中の文字の大きさを変更した。
- minipage を用いて図表を横に並べた。
- \cdot を `cdot` に変更した。
- $'$ を `prime` に変更した。
- 改行を `bigskip` に変更した。
- 誤字を修正した。

参考文献

- [1] 著者 1, 著者 2, 数値計算の基礎, 某出版社, 2005.
- [2] Cox D.A., Little J. and O'Shea D., Using Algebraic Geometry, Springer, 2005.
- [3] <http://mathworld.wolfram.com/NewtonsMethod.html>