情報数学C

Mathematics for Informatics C

第4回 非線形方程式の求根問題 (2分法,ニュートン法,収束性と初期値,DKA法)

> 情報メディア創成学類 藤澤誠

今回の講義内容

- ▶ 今日の問題
- 求根問題の数値計算での解き方
- 2分法
- ニュートン法
- 収束性と初期値,DKA法

今回の講義で解く問題

$$f(x) = 0$$

を満たす根χを求めよ

今回の講義で解く問題

xについての方程式f(x) = 0の解を求める問題

例1)
$$f(x) = ax + b = 0$$

f(x)が**線形方程式**なら解は x = -b/a と 簡単に求められる!

例2)
$$f(x) = 2x^5 + 5x^3 + 3x + 1 = 0$$

f(x)が非線形方程式の場合,解(根)を求めるのは容易ではない \Rightarrow 求根問題

(2次方程式なら解の公式,3次や4次でもカルダノやフェラリの公式でも解けるが,5次以降は直接解法がない)

今回の講義で解く問題

求根はどんなところで使われる?

情報

情報可視化においてある量が一定になる曲面を抽出するのに用いられる(f(x) - T = 0) となる点の抽出). CGでのレイトレーシングなどでも用いられる.

地形:地図

高さ場のデータから等高線を求めるなど

全般

 $f(x) = x^2 - 2$ とすれば $\sqrt{2}$ の値が求まるなど、数学的に定義されているものの実際の値を求めるときによく使われる

これ自体で問題を解くというより,問題を解く過程で求根が必要とされることが多い

今回の講義内容

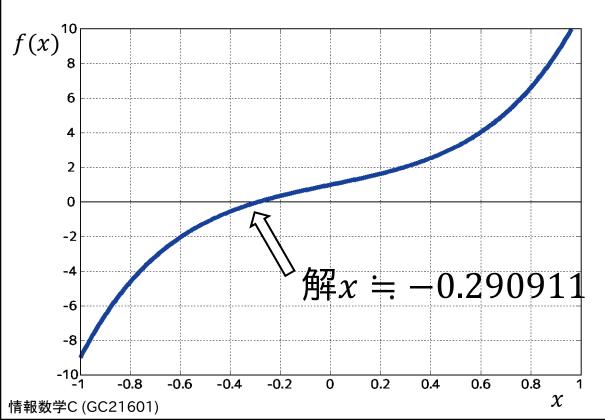
- 今日の問題
- 求根問題の数値計算での解き方
- 2分法
- ニュートン法
- 収束性と初期値
- ホーナー法, DKA法

求根問題の数値計算での解き方

1回目の講義の復習

$$f(x) = 2x^5 + 5x^3 + 3x + 1 = 0$$

⇒ グラフにすれば解が分かる?

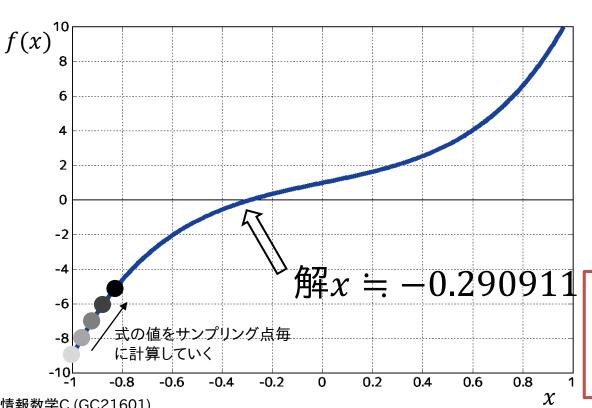


この精度の解をどうやって求めるのか?

求根問題の数値計算での解き方

初期値からサンプリング点を等間隔に取っていく 方法だと?

$$f(x) = 2x^5 + 5x^3 + 3x + 1 = 0$$



初期値 $x^{(0)} = -1$ とする 1×10⁻⁶の精度(小数点 以下6桁)が必要な場合

$$f(-1) = -9$$

 $f(-0.999999) = -8.99997$
 $f(-0.999998) = -8.99994$
 $f(-0.999997) = -8.99992$
:

解にたどり着くまでに **70万回以上***f*(*x*)を計算 しなければならない!

求根問題の数値計算での解き方

等間隔にサンプリング点を取るのは**非効率的**

⇒ どうすれば良いのか?



適応的にサンプリング間隔を変えれば良い

- 2分法
 - ⇒ 関数値のみで計算可能
- ニュートン法
 - ⇒ 導関数を使うことで効率的に

今回の講義内容

- 今日の問題
- 求根問題の数値計算での解き方
- 2分法
- ニュートン法
- 収束性と初期値
- ホーナー法, DKA法

情報数学C (GC21601) 10

適応的にサンプリング間隔を変えればより早く解に たどり着く?

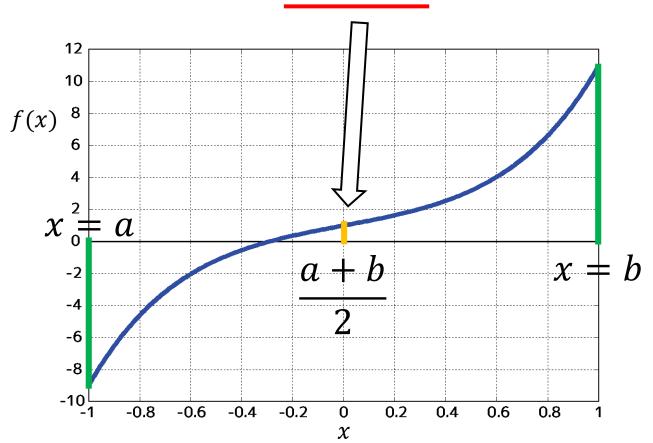
⇒ どのように変えるのかが重要

前提条件: f(a) < 0およびf(b) > 0(もしくはこれの逆)であるならばx = aとx = bの間にf(x) = 0となる点が少なくとも1つは存在する(中間値の定理より)

区間[a,b]を**2分割**して、それぞれの区間内で解があるかを調べ、解のある区間をまた2分割する、…としていけば効率がよさそう

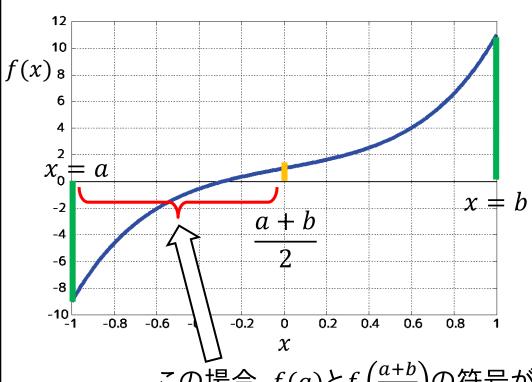
2分法

初期値としてf(a)f(b) < 0である範囲[a,b]が与えられているとき, aとbの中点 $\frac{a+b}{2}$ を考える



情報数学C (GC21601) 12

$$f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$
を計算して、その値を $f(a)$ 、 $f(b)$ と比べる

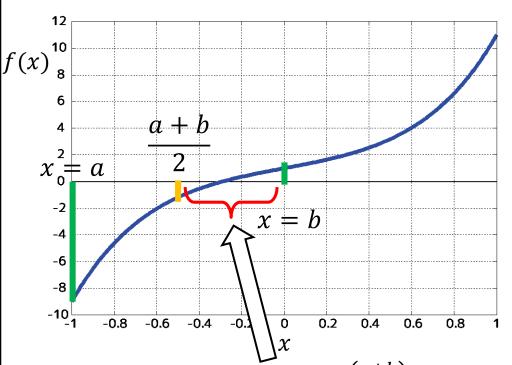


$$f(a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) < 0$$
の場合: 解は区間 $\left[a, \frac{a+b}{2}\right]$ に存在

$$x = b$$
 $f\left(\frac{a+b}{2}\right)f(b) < 0$ の場合: 解は区間 $\left[\frac{a+b}{2},b\right]$ に存在

この場合, f(a)と $f\left(\frac{a+b}{2}\right)$ の符号が異なるので左側の範囲に解があることが分かる

中点 $\frac{a+b}{2}$ を新しいa(もしくはb)にして再度中点を計算

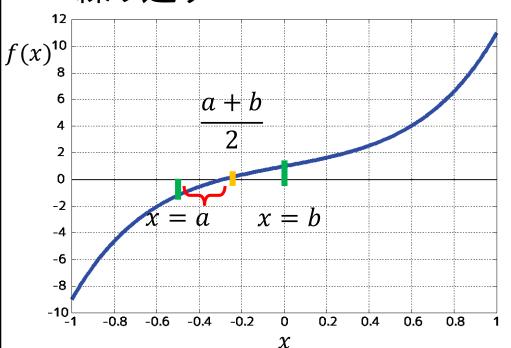


新しい中点で同様に以下を判定 $f(a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) < 0$ の場合: 解は区間 $[a,\frac{a+b}{2}]$ に存在

$$f\left(\frac{a+b}{2}\right)f(b) < 0$$
の場合: 解は区間 $\left[\frac{a+b}{2},b\right]$ に存在

この場合, $f\left(\frac{a+b}{2}\right)$ とf(b)の符号が異なるので右側の範囲に解があることが分かる

範囲[a,b]の長さが許容誤差以下になるまで処理を 繰り返す



区間は毎ステップ1/2に なっていくので解の精度 を以下の式で予測可能

$$\varepsilon = \frac{b - a}{2^n}$$

注) ここでのa,bは初期区間

許容誤差
$$\varepsilon$$
になるための繰返し回数: $n = \log_2 \frac{b - a}{\varepsilon}$

(例えば,初期範囲[-1,1]で 1×10^{-6} の精度を得るには21回反復が必要)

2分法の計算手順

- 1. 初期範囲[a,b]を設定, $x_l = a, x_r = b$ とし, $f(x_l), f(x_r)$ を計算しておく
- 2. 以下の手順を収束するまで繰り返す
 - 1. 中点 $x_{mid} = \frac{x_l + x_r}{2}$ における関数値 $f(x_{mid})$ を計算
 - 2. $f(x_l)f(x_{mid}) < 0$ なら $x_r = x_{mid}$, $f(x_{mid})f(x_r) < 0$ なら $x_l = x_{mid}$ とする
 - 3. $|x_r x_l| < \varepsilon$ or $|f(x_{mid})| < \varepsilon$ なら反復終了

中点でf = 0となった場合に 対応するための収束条件

関数値f(x)の計算は**毎ステップ1回のみ**

2分法のコード例

```
double f = func(x1);
double fmid = func(xr);
double dx = fabs(xr-x1), xmid;
int k;
for(k = 0; k < max_iter; ++k){
   xmid = 0.5*(x1+xr); // 中点
   dx *= 0.5; // 区間幅を1/2にする
   fmid = func(xmid); // 中点での関数値
   // 収束判定
   if(dx < eps | | fmid == 0.0) break;
  // 新しい区間
   if(f*fmid < 0) \{ xr = xmid; \}
   else{ x1 = xmid; f = fmid;}
x = xmid;
```

初期範囲での $f(x_l)$, $f(x_r)$ の計算: 後で値をスワップしないでいいように f_{mid} に新しい区間での $f(x_r)$ を格納 している

中点とそこでの関数値 $f(x_{mid})$ の計算:収束判定 用の区間幅も計算しておく

収束判定:関数値も収束判定 に入れることで $f(x_{mid}) = 0$ と なった場合に対応

新しい区間の設定: $f \times f_{mid} < 0$ で 左領域を新しい範囲に $(x_r = x_{mid})$, $f \times f_{mid} > 0$ で右領域を新しい範囲に $(x_l = x_{mid})$. 前者は $f(x_l)$ が変わらない,前者は $f(x_r)$ が変わるので f_{mid} で置き換える必要がある

2分法の実行結果例

```
f(x) = 2x^5 + 5x^3 + 3x + 1 = 0 \qquad \text{ff } x = -0.290911
```

許容誤差 $\varepsilon = 1 \times 10^{-6}$,初期探索範囲[-1,1]

```
0: [-1, 1],
                         fmid = 1
1 : [-1, 0],
                    fmid = -1.1875
                  fmid = 0.169922
2: [-0.5, 0],
3 : [-0.5, -0.25], \qquad fmid = -0.403503
4 : [-0.375, -0.25], fmid = -0.0960484
5 : [-0.3125, -0.25], fmid = 0.0414938
6 : [-0.3125, -0.28125], fmid = -0.0260621
: (省略)
16 : [-0.290924, -0.290894], fmid = 1.15822e-05
17 : [-0.290924, -0.290909], fmid = -2.15376e-05
18 : [-0.290916, -0.290909], fmid = -4.97764e-06
19 : [-0.290913, -0.290909], fmid = 3.30229e-06
20 : [-0.290913, -0.290911], fmid = -8.37673e-07
x = -0.290912
                      21回の反復で処理終了
```

2分法の実行結果例(2分法によるπの計算)

$$f(x) = \cos\left(\frac{x}{2}\right) = 0$$
 $\Re x = \pi = 3.14159265 \cdots$

許容誤差 $\varepsilon = 1 \times 10^{-6}$,初期探索範囲[3,4]

```
0: [3, 4], fmid = -0.178246

1: [3, 3.5], fmid = -0.0541771

2: [3, 3.25], fmid = 0.00829623

3: [3.125, 3.25], fmid = -0.0229517

4: [3.125, 3.1875], fmid = -0.00732861

5: [3.125, 3.15625], fmid = 0.000483827

: (省略)

15: [3.14157, 3.1416], fmid = 3.17494e-06

16: [3.14159, 3.1416], fmid = -6.39758e-07

17: [3.14159, 3.14159], fmid = 1.26759e-06

18: [3.14159, 3.14159], fmid = 3.13916e-07

19: [3.14159, 3.14159], fmid = -1.62921e-07

x = 3.14159
```

*1回目の授業で紹介したライプニッツの公式による円周率 π の計算では1万項まで計算して 10^{-4} 程度の誤差

今回の講義内容

- 今日の問題
- 求根問題の数値計算での解き方
- 2分法
- ニュートン法
- 収束性と初期値
- ホーナー法, DKA法

情報数学C (GC21601) 20

2分法より収束を早めるには?

- 分割数を増やしてみる?
 例) 初期範囲[-1,1]で1×10⁻⁶の精度を得るための 反復回数は?
 - 2分法:21回,3分法:14回,4分法:11回
 - ⇒ 反復回数は減らせそうだけど…

分割数を増やすと毎反復でのf(x)の**計算回数** が増える(2分法だと1回,3分法だと2回,…)

⇒ 総計算量が増える可能性あり

分割数を増やすのではない別の方法が必要

- 現在の関数値f(x)を使えないか? f(x)の絶対値が大きいときは分割幅を大きく, 小さいときに分割幅を小さく
 - ⇒ 絶対値だと**分割幅の設定が難しい**
- 関数値の**相対変化量**を使えないか?

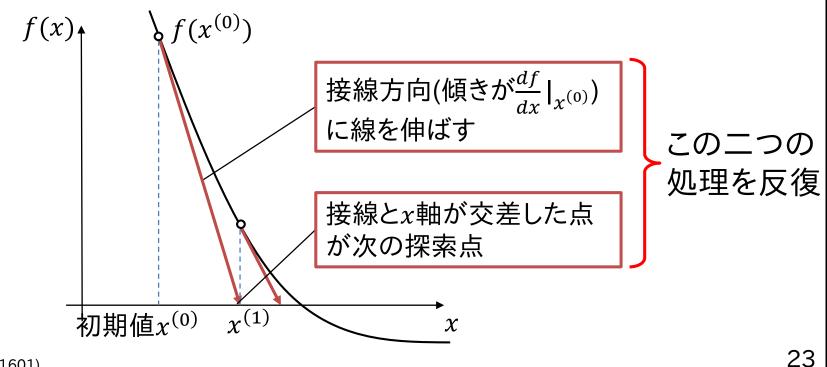
相対変化量:
$$\frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

$$\Delta x \to 0$$
の極限をとると $\frac{df}{dx}$

ニュートン法

ニュートン法(ニュートン・ラフソン法)の考え方

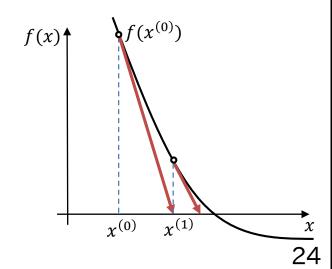
- 初期値 $x^{(0)}$ からスタート (範囲[a,b]ではなく初期値のみ)
- 関数の微分値 $\frac{df}{dx}$ に基づいて次の値 $x^{(k+1)}$ を決定



情報数学C (GC21601)

ニュートン法の処理を式にしてみよう

- 接線方向(傾きが $\frac{df}{dx}|_{x^{(0)}}$)に線を伸ばす $(x^{(0)}, f(x^{(0)}))$ での接線: $y = f'(x^{(0)})(x x^{(0)}) + f(x^{(0)})$ (ただし, f'(x) = df/dxとしている)
- 接線とx軸が交差した点が次の探索点 次の探索点(接線の式でy = 0となる点):



ニュートン法の計算手順

- 1. 初期値x⁽⁰⁾を設定
- 2. 以下の手順を収束するまで繰り返す(*k* = 0 ~)
 - 1. $x^{(k)}$ での関数値 $f(x^{(k)})$ と導関数値(傾き) $f'(x^{(k)})$ を計算
 - 2. 次の計算点 $x^{(k+1)} = x^{(k)} \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})}$ を求める
 - 3. $|x^{(k+1)} x^{(k)}| < \varepsilon$ もしくは $|f(x^{(k+1)})| < \varepsilon$ なら反復終了

ニュートン法のコード例

```
int k;
for(k = 0; k < max iter; ++k){
   // 現在の位置xにおける関数値と導関数の計算
   f = func(x);
                                x^{(k)}での関数値と導関数の計算
   df = dfunc(x);
     導関数の結果から次の位置を計算
                                x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})}で次の計
   x = x-f/df;
   // 収束判定
                                算点位置を求める
   dx = fabs(f/df);
   if(dx < eps || fabs(f) < eps){
                                安定性をより高めたいならこの処
      break;
                                理の前にdfが0でないかの判定
```

を入れる

ニュートン法の実行結果例

$$f(x) = 2x^5 + 5x^3 + 3x + 1 = 0 \qquad \text{for } x = -0.290911$$

許容誤差 $\varepsilon = 1 \times 10^{-6}$,初期值 $x^{(0)} = -1$

```
0: f(-1) = -9

1: f(-0.678571) = -2.88573

2: f(-0.438636) = -0.770354

3: f(-0.315502) = -0.109784

4: f(-0.291595) = -0.00296924

5: f(-0.290912) = -2.26919e-06

x = -0.290911 6回の反復で処理終了
```

2分法での反復回数21回から6回へと大幅に減っている

情報数学C (GC21601) 27

- ニュートン法の特徴
- 2分法と違い初期値のみでOK
- ・ 導関数が必要
 - 1反復内での計算量が増える?
 - ⇒ 導関数は元の関数より次数が減ることが多い
 - ⇒ 計算量が増えても**反復回数はそれ以上に 減って**いるので問題なし
 - 離散データなどで導関数を数学的に計算 できない場合は?

セカント法(割線法)

離散的なデータを扱う場合,必ずしも**導関数が数学 的に計算できない**

⇒ 導関数を何らかの形で近似する必要がある



微分の代わりに**差分**を使う

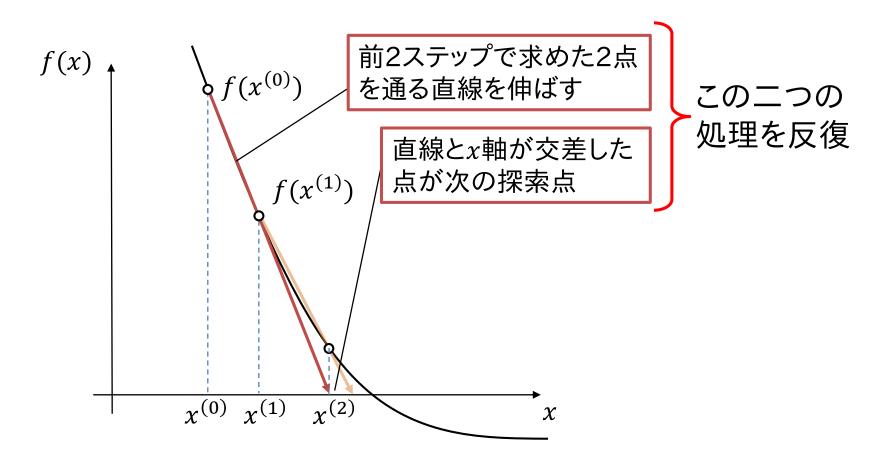
$$f'(x^{(k)}) \simeq \frac{f(x^{(k)}) - f(x^{(k-1)})}{x^{(k)} - x^{(k-1)}}$$

$$x$$
の更新式: $x^{(k+1)} = x^{(k)} - f(x^{(k)}) \frac{x^{(k)} - x^{(k-1)}}{f(x^{(k)}) - f(x^{(k-1)})}$

セカント法(割線法)

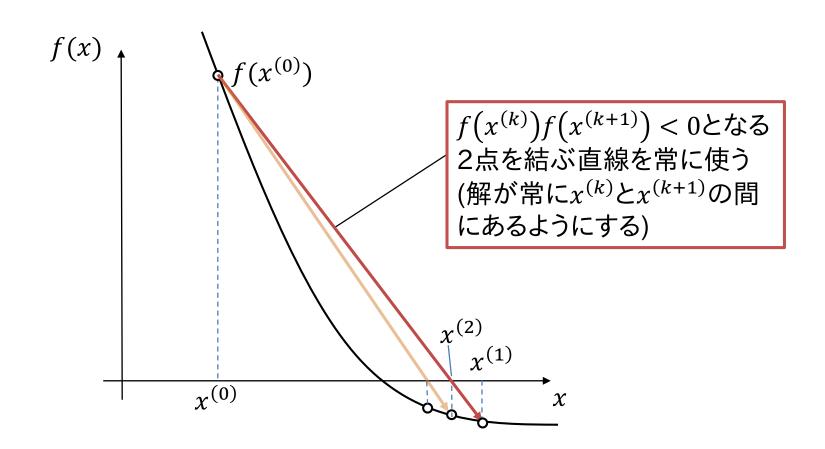
セカント法(割線法)

セカント法(割線法)の考え方



挟み撃ち法

同様の計算方法として挟み撃ち法もある



セカント法(割線法)

セカント法(割線法)の計算手順

- 1. 初期値 $x^{(0)}, x^{(1)}$ を設定
- 2. 以下の手順を収束するまで繰り返す $(k = 1 \sim)$
 - 1. $x^{(k)}$ での関数値 $f(x^{(k)})$ を計算 or $x^{(k)}$ での値 $f(x^{(k)})$ を離散データから取り出す
 - 2. 次の計算点 $x^{(k+1)} = x^{(k)} f(x^{(k)}) \frac{x^{(k)} x^{(k-1)}}{f(x^{(k)}) f(x^{(k-1)})}$ を求める
 - 3. $|x^{(k+1)} x^{(k)}| < \varepsilon$ もしくは $|f(x^{(k+1)})| < \varepsilon$ なら反復終了

手順自体はニュートン法と同じなのでコード例はなし

- ニュートン法の特徴
- 2分法と違い初期値のみでOK
- ・ 導関数が必要
 - 1反復内での計算量が増える?
 - ⇒ 総計算時間は減る
 - 離散データなどで導関数を数学的に計算で きない場合は?
 - ⇒ セカント法
- 多次元への拡張は可能か?

多次元のニュートン法

n次元($x_0, x_1, ..., x_{n-1}$)のニュートン法は?

変数がn個,式もn個ある場合:

f,x,0はベクトル(太 字表記)になっている ことに注意

ここで
$$\mathbf{x} = (x_0, x_1, ..., x_{n-1})^T$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (f_0(\mathbf{x}), f_1(\mathbf{x}), ..., f_{n-1}(\mathbf{x}))^T$$

多次元のニュートン法

kステップ目の近似値 $x^{(k)}$ の周りでテイラー展開

$$f(x^{(k+1)}) = f(x^{(k)}) + f'(x^{(k)})(x^{(k+1)} - x^{(k)}) + \cdots$$

 $n \geq 2$ の項を無視して $((x^{(k+1)} - x^{(k)})$ の値が小さければ無視できる), $x^{(k+1)}$ について解くと:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \frac{f(x^{(k+1)}) - f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})}$$

この式で解けるのか? f'って何?

参考) 関数f(x)のa周りのテイラー展開:

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x - a) + \frac{f''(a)(x - a)^2}{2!} + \cdots$$

多次元のニュートン法

多変数関数のテイラー展開からf'(x)はヤコビ行列J

$$f'(x) = J(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_0}{\partial x_0} & \frac{\partial f_0}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_0}{\partial x_{n-1}} \\ \frac{\partial f_1}{\partial x_0} & \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_{n-1}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_{n-1}}{\partial x_0} & \frac{\partial f_{n-1}}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_{n-1}}{\partial x_{n-1}} \end{pmatrix}$$

f'(x)で割る = J(x)の逆行列を掛ける

参考) 2変数関数のテイラー展開:

$$f(x_0, x_1) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{((x_0 - a_0)^n (x_1 - a_1)^n)}{n! \, m!} \left(\frac{\partial^{n+m} f}{\partial x_0^n \partial x_1^m} \right)$$

- · 求めたいのは $x^{(k)}$ から $x^{(k+1)}$ への変化量 $\Rightarrow \delta = x^{(k+1)} x^{(k)}$ とする
- ·求根問題なので $f(x^{(k+1)}) = \mathbf{0}$ になってほしい

テイラー展開した式
$$(f(x^{(k+1)}) = f(x^{(k)}) + f'(x^{(k)})(x^{(k+1)} - x^{(k)}))$$
より:
$$J(x)\delta = -f(x^{(k)})$$

⇒ **δ**を未知変数とした**線形システム**なので**ガウスの消去法や三角分解で解ける**

 δ について解いた後に $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \delta$ でxを更新

多次元版ニュートン法の計算手順

- 1. 初期値ベクトル*x*⁽⁰⁾を設定
- 2. 以下の手順を収束するまで繰り返す(*k* = 0 ~)
 - 1. $x^{(k)}$ での関数値 $f(x^{(k)})$ とヤコビ行列J(x)の各要素を計算
 - 2. $J(x)\delta = -f(x^{(k)})$ をガウスの消去法などで解く
 - 3. $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \delta$ でxを更新
 - 4. $|\delta| < \varepsilon$ もしくは $|f(x^{(k+1)})| < \varepsilon$ なら反復終了

多次元のニュートン法のコード例

```
Jはn \times (n+1)の配列,関数f_i(x)は構造体を使ってfunc[i].func(x)と表している.
導関数f_i'(x)はfunc[i].dfunc(x) \leftarrow 返値が\left(\frac{\partial f_i}{\partial x_0}, ..., \frac{\partial f_i}{\partial x_{n-1}}\right)のベクトル(配列)
int k;
for(k = 0; k < max iter; ++k){
    // 現在の位置xにおける関数値の計算
    for(int i = 0; i < n; ++i) f[i] = -funcs[i].func(x);
    // ヤコビ行列の計算
    for(int i = 0; i < n; ++i){
        df = funcs[i].dfunc(x);
        for(int j = 0; j < n; ++j) J[i][j] = df[j];</pre>
    // 線形システムを解いてδを計算
    for(int i = 0; i < n; ++i) J[i][n] = f[i];
    GaussEliminationWithPivoting(J, n);
    // xを更新
    for(int i = 0; i < n; ++i) x[i] += J[i][n]; \leftarrow
    // 収束判定
    d = 0.0;
    for(int i = 0; i < n; ++i) d += fabs(f[i]);</pre>
    if(d < eps) break;</pre>
```

線形システムの係数 行列と右辺項ベクト ルの計算

ガウスの消去法で 線形システムを解く

xの更新(δ は拡大行 列Jのn列目に格納 されることに注意)

多次元のニュートン法の実行結果例

$$\begin{cases} f_0(x,y) = x^2 - 4xy + y^2 = 0 \\ f_1(x,y) = x^2 + y^2 - 2 = 0 \end{cases}$$

$$(\frac{\partial f_0}{\partial x} = 2x - 4y, \frac{\partial f_0}{\partial y} = -4x + 2y, \frac{\partial f_1}{\partial x} = 2x, \frac{\partial f_1}{\partial y} = 2y)$$

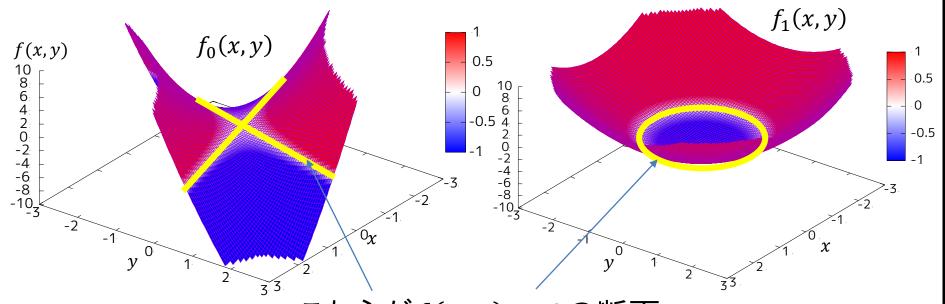
許容誤差 $\varepsilon = 1 \times 10^{-6}$,初期値 $(x^{(0)}, y^{(0)}) = (1, 0)$

```
0: f0(1, 0) = -1, f1(1, 0) = 1
1: f0(1.5, 0.5) = 0.5, f1(1.5, 0.5) = -0.5
2: f0(1.375, 0.375) = 0.03125, f1(1.375, 0.375) = -0.03125
3: f0(1.36607,0.366071) = 0.000159439, f1(1.36607,0.366071) = -0.000159439
4: f0(1.36603,0.366025) = 4.23634e-09, f1(1.36603,0.366025) = -4.23634e-09
(x1,x2) = (1.36603, 0.366025) 5回の反復で処理終了
```

解は一つだけ?

各関数の形を見てみよう

$$\begin{cases} f_0(x,y) = x^2 - 4xy + y^2 = 0 \\ f_1(x,y) = x^2 + y^2 - 2 = 0 \end{cases}$$



これらがf(x,y) = 0の断面

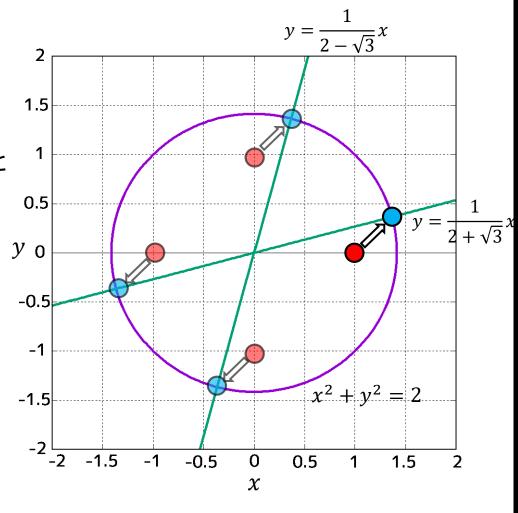
xy平面を見てみる:

$$\begin{cases} f_0(x,y) = x^2 - 4xy + y^2 = 0\\ f_1(x,y) = x^2 + y^2 - 2 = 0 \end{cases}$$

$$\int_{1}^{\infty} f_i(x,y) = 0$$
の平面上だと
$$\begin{cases} y = \frac{1}{2 \pm \sqrt{3}} x\\ x^2 + y^2 = 2 \end{cases}$$
 (半径 $\sqrt{2}$ の円)

初期値 $(x^{(0)}, y^{(0)}) = (1, 0)$ で解(x, y) = (1.36603, 0.366025)が得られた

初期値を変えてやれば 他の解も得られそう



初期値を変えた結果

(x1,x2) = (0.366025, 1.36603)

```
\begin{cases} f_0(x,y) = x^2 - 4xy + y^2 = 0 \\ f_1(x,y) = x^2 + y^2 - 2 = 0 \end{cases}
初期値(x^{(0)}, y^{(0)}) = (0, 1)
0 : f0(0,
               1) = -1,
                                      f1(0,
                                                  1)
1: f0(0.5, 1.5) = 0.5,
                                     f1(0.5,
                                                 1.5)
                                                          = -0.5
```

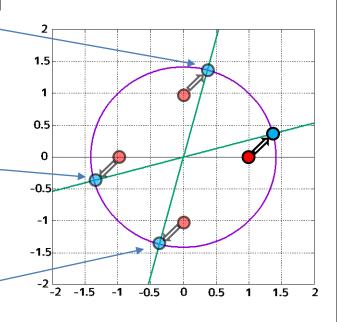
初期値 $(x^{(0)}, y^{(0)}) = (-1, 0)$

```
0: f0(-1, 0) = -1, f1(-1, 1: f0(-1.5, -0.5) = 0.5, f1(-1.5, -1.5)
                                                   0)
                                                  -0.5)
                                                            = -0.5
2: f0(-1.375, -0.375) = 0.03125, f1(-1.375, -0.375)
                                                             = -0.03125
3: f0(-1.36607, -0.366071) = 0.000159439, f1(-1.36607, -0.366071) = -0.000159439
4: f0(-1.36603, -0.366025) = 4.23634e-09, f1(-1.36603, -0.366025) = -4.23634e-09
(x1,x2) = (-1.36603, -0.366025)
```

2: f0(0.375, 1.375) = 0.03125, f1(0.375, 1.375) = -0.031253: f0(0.366071, 1.36607) = 0.000159439, f1(0.366071, 1.36607) = -0.0001594394: f0(0.366025, 1.36603) = 4.23634e-09, f1(0.366025, 1.36603) = -4.23634e-09

初期値 $(x^{(0)}, y^{(0)}) = (0, -1)$

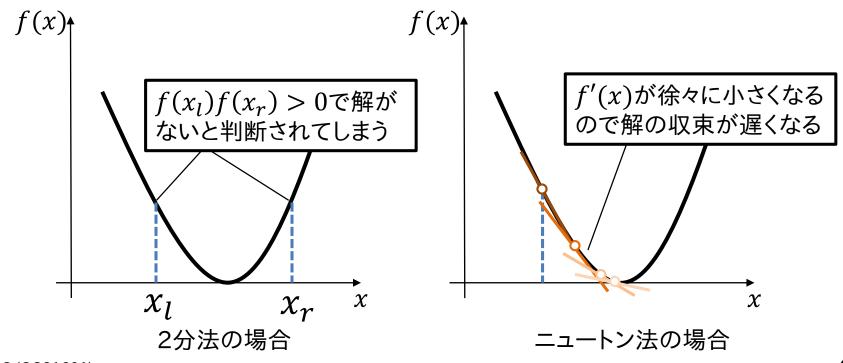
```
0: f0(0, -1) = -1, f1(0, 1: f0(-0.5, -1.5) = 0.5, f1(-0.5, -1.5)
                                                    -1)
                                                              = 1
                                                    -1.5)
                                                              = -0.5
2 : f0(-0.375, -1.375) = 0.03125, f1(-0.375,
                                                    -1.375)
                                                              = -0.03125
3: f0(-0.366071, -1.36607) = 0.000159439, f1(-0.366071, -1.36607) = -0.000159439
4: f0(-0.366025, -1.36603) = 4.23634e-09, f1(-0.366025, -1.36603) = -4.23634e-09
(x1,x2) = (-0.366025, -1.36603)
```



ニュートン法

重根の場合でも解は求まる?

- **2分法**: 根の前後の符号が同じになるので×
- **ニュートン法**: 収束は遅くなるけど解は求まる



今回の講義内容

- 今日の問題
- 求根問題の数値計算での解き方
- 2分法
- ニュートン法
- 収束性と初期値
- ホーナー法, DKA法

情報数学C (GC21601) 45

解に収束するための条件は?どのくらいの早さで収束する?

⇒ 不動点定理で解への収束条件が分かる

バナッハの不動点定理(縮小写像の定理)

閉区間I内での写像*を行う関数gについて $\|g(x_1) - g(x_2)\| \le L\|x_1 - x_2\|$ が成り立つような $L(0 \le L < 1)$ が存在するとき, g(x)は**縮小写像**という(**リプシッツ条件**). このときのLをリプシッツ定数という.

(定理は次のページに続く)

*写像は2つの集合間の関係を表すもので,例えば関数 y = f(x)も $x \in \Re$ から $y \in \Re$ への写像($\Re \to \Re$)といえる.

バナッハの不動点定理のつづき

g(x)が縮小写像なら, $x^* = g(x^*)$ となる**不動点を必 ず持つ.** (cond)

この写像が例えばニュートン法の更新式だったとすると:

$$x^{(k+1)} = g(x^{(k)}) = x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})}$$

もし, g(x)がリプシッツ条件を満たすならば, K回目の反復で $x^{(K)} = g(x^{(K)})$ となる不動点が存在 \Rightarrow 要するにL < 1ならいつか解に収束するということ

リプシッツ条件を扱いやすいように**シンプル**にしてみる

閉区間*内の $2点x_1,x_2$ についてg(x)がその区間内で微分可能ならば, 平均値の定理より,

$$g(x_1) - g(x_2) = g'(\xi)(x_1 - x_2)$$

となる ξ が x_1 と x_2 の間に存在する.

リプシッツ条件 $||g(x_1) - g(x_2)|| \le L||x_1 - x_2||$ から,

$$||g(x_1) - g(x_2)|| = ||g'(\xi)|| ||x_1 - x_2|| \le L||x_1 - x_2||$$

$$||g'(x)|| \le L$$

を満たすならば, g(x)はリプシップ条件を満たす $(0 \le L < 1$ なので $\|g'(x)\| < 1$ が条件になる)

ニュートン法における収束条件

$$x^{(k)}$$
を x とすると更新式は: $g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$ g を x で微分すると

$$g'(x) = 1 - \left(\frac{f'(x)}{f'(x)} + f(x)\left(-\frac{1}{(f'(x))^2}\right)f''(x)\right)$$

$$||g'(x)|| = \left| |f(x) \frac{f''(x)}{(f'(x))^2} \right| < 1 : =ュートン法の収束条件$$

注) あくまでこの条件は局所収束性で大域収束性ではない

例)
$$f(x) = ax^2$$
の場合, $g'(x) = ax^2 \frac{(2a)}{(2ax)^2} = \frac{1}{2} < 1$ なので安定 $\Rightarrow ax^2$ は凸関数の一種(この辺の話は次回に)

2分法, ニュートン法の収束速度は?

真値を α とするとkステップ目の誤差は:

$$\epsilon^{(k)} = \chi^{(k)} - \alpha$$

2分法の誤差収束

1ステップ毎に範囲が1/2になるので,

$$\epsilon^{(k+1)} = \frac{\epsilon^{(k)}}{2}$$

誤差が1反復処理毎に定数倍(< 1)となっているので, 2分法は**1次収束**

ニュートン法の誤差収束(単根の場合)

$$\epsilon^{(k)} = x^{(k)} - \alpha$$
をニュートン法の更新式 $x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})}$ に代入

$$\epsilon^{(k+1)} = \epsilon^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})}$$

 $f(x^{(k)})$ を真値 α 周りでテイラー展開 $(x^{(k)})$ が α に近いと仮定)

$$f(x^{(k)}) \simeq f(\alpha) + f'(\alpha) (x^{(k)} - \alpha) + \frac{f''(\alpha) (x^{(k)} - \alpha)^2}{2!}$$

$$f(\alpha) = 0 \qquad \epsilon^{(k)}$$

$$f(x^{(k)}) \simeq f'(\alpha) \epsilon^{(k)} + \frac{f''(\alpha) (\epsilon^{(k)})^2}{2}$$

同様に $f'(x^{(k)})$ もテイラー展開(こちらは $f'(\alpha) \neq 0$)

$$f'(x^{(k)}) \simeq f'(\alpha) + f''(\alpha)\epsilon^{(k)}$$

参考) 関数f(x)のa周りのテイラー展開:

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x - a) + \frac{f''(a)(x - a)^2}{2!} + \cdots$$

ニュートン法の誤差収束(単根の場合)

 $\epsilon^{(k+1)} = \epsilon^{(k)} - f(x^{(k)})/f'(x^{(k)})$ にそれぞれ代入してやると:

$$\epsilon^{(k+1)} = \epsilon^{(k)} - \frac{f'(\alpha)\epsilon^{(k)} + \frac{1}{2}f''(\alpha)\big(\epsilon^{(k)}\big)^2}{f'(\alpha) + f''(\alpha)\epsilon^{(k)}} = \frac{f''(\alpha)\big(\epsilon^{(k)}\big)^2}{2(f'(\alpha) + f''(\alpha)\epsilon^{(k)})}$$

真値 α 近くなら $f'(\alpha) \gg f''(\alpha)\epsilon^{(k)}$ なので*

$$\epsilon^{(k+1)} = \frac{f''(\alpha)}{2f'(\alpha)} (\epsilon^{(k)})^2$$

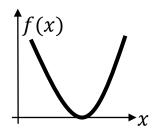
誤差が1反復処理毎に2乗となっているので、

単根の場合のニュートン法は2次収束

ニュートン法の誤差収束(重根の場合)

重根の場合, $f(\alpha) = 0$ であるとともに $f'(\alpha) = 0$ でもあるので

$$\epsilon^{(k+1)} = \frac{f''(\alpha) \left(\epsilon^{(k)}\right)^2}{2(f'(\alpha) + f''(\alpha)\epsilon^{(k)})} = \frac{1}{2} \epsilon^{(k)}$$

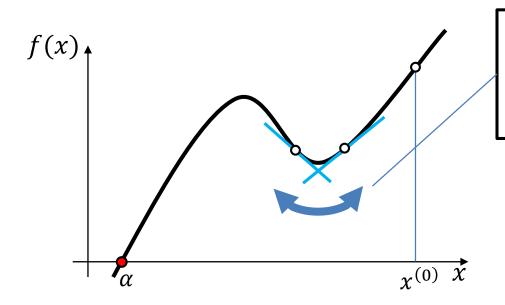


誤差が1反復処理毎に定数倍(< 1)となっているので, 重根の場合のニュートン法は**1次収束** (2分法と同じ)

上の例は2重根の場合ですが、m重根 $(f'(\alpha)$ から $f^{(m-1)}(\alpha)$ が0で、 $f^{(m)}(\alpha) \neq 0$)でも**1次収束**する*. ただし、収束率が $\frac{m-1}{m}$ なのでm**が大きいほど収束は遅くなる**

ニュートン法が常に良いのか?

ニュートン法は収束が早く,重根にも対応できるが, 初期値によっては解に収束しない場合もある



近似解 $x^{(k)}$ が進んだり 戻ったり(振動)して,真値 にたどり着かない

この場合でも**2分法**なら初期 範囲が問題なければ**確実に 解が得られる**

2分法である程度解に近づいたならそれを**初期値として** ニュートン法を使う

情報数学C (GC21601) 54

2分法,ニュートン法の拡張

- Brentのアルゴリズム
 2分法と割線法を組み合わせて、ステップ毎に 最適な方法を選択する + 直線ではなく2次関
 数でx = 0との交点を求める(逆2次補間)
 ⇒離散データに対してよく用いられる方法
- Muller法, Laguerre(ラゲール)法, DKA法など 関数f(x)を多項式に限定することでより効率 的に解くことができる方法 (DKA法なら初期値も計算で求められる)

(DKA法はこの後説明します)

今回の講義内容

- 今日の問題
- 求根問題の数値計算での解き方
- 2分法
- ニュートン法
- 収束性と初期値
- ホーナー法, DKA法

情報数学C (GC21601) 56

多項式に対する求根問題

f(x)を**多項式(代数方程式)**に限定してみよう

*n*次多項式:

$$f(x) = a_0 x^n + a_1 x^{n-1} + \dots + a_{n-2} x^2 + a_{n-1} x + a_n$$

f(x)を計算するのに必要な**乗算回数**は $n + (n-1) + \dots + 2 + 1 = \frac{n(n+1)}{2}$ 回で加算がn回

 \Rightarrow 乗算回数が多い(e.g. n = 100で乗算回数5050回)



乗算回数を減らすには?

ホーナー法

ホーナー法

ホーナー(Horner)法での多項式:

n次多項式:

$$f(x) = ((\cdots((a_0x + a_1)x + a_2)x + \cdots + a_{n-2})x + a_{n-1})x + a_n$$

多項式計算のコード例:

```
double func(double x, vector<double> a, int n){
    double f = a[0];
    for(int i = 1; i <= n; ++i){
        f = a[i]+f*x;
    }
    return f</pre>
```

$$a'_0 = a_0$$
 $a'_1 = a'_0 x + a_1$
 $a'_2 = a'_1 x + a_2$
 \vdots
 $a'_n = a'_{n-1} x + a_n$
と順番に計算*

f(x)を計算するのに必要な**乗算回数**はn回で加算もn回 \Rightarrow 乗算回数が少ない(e.g. n = 100で乗算回数100回)

f(x)を多項式(代数方程式)に限定した求根問題

n次多項式は重根なしならn**個の複素数解**を持つ* $\rightarrow n$ 個の複素数解を**1度に計算する**方法を考えて みよう

多項式を変形する前に,分かりやすくするために

$$P(z) = z^{n} + c_{1}z^{n-1} + \dots + c_{n-2}z^{2} + c_{n-1}z + c_{n} = 0$$

と変数を変えます(複素解なので未知数をzにして,変数を減らすために全体を a_0 で割って $c_i = a_i/a_0$ とした)

*実数も複素数の一部とする.また重根ありでも $\alpha_1=\alpha_2$ の 2つの同じ値の解があるとするとn個の解となる 59

代数方程式の解を α_i (i=0,1,...,n-1)とすると多項式の因数分解によって: n-1

$$P(z) = (z - \alpha_0)(z - \alpha_1) \cdots (z - \alpha_{n-1}) = \prod_{i=0}^{n-1} (z - \alpha_i)$$

ニュートン法の更新式にするためにP(z)の微分*を計算しておく

$$P'(z) = \prod_{i=1}^{n-1} (z - \alpha_i) + \prod_{i=0, i \neq 1}^{n-1} (z - \alpha_i) + \dots + \prod_{i=0, i \neq n-2}^{n-1} (z - \alpha_i) + \prod_{i=0}^{n-2} (z - \alpha_i)$$

 $z=\alpha_0$ ならば $z-\alpha_0=0$ となるので上の式は第1項だけが残る。同様にして

 $Z = \alpha_j$ **のとき第j項のみ残る.** これより, Z_j が解に近い時, 以下の**近似式**

が成り立つ

$$P'(z_j) \simeq \prod_{i=0, i \neq j}^{n-1} (z_j - z_i)$$
 $(j = 0, 1, ..., n-1)$

前ページ青枠の式をニュートン法の更新式に代入

$$z_{j}^{(k+1)} = z_{j}^{(k)} - \frac{P\left(z_{j}^{(k)}\right)}{P'\left(z_{j}^{(k)}\right)} = z_{j}^{(k)} - \frac{P\left(z_{j}^{(k)}\right)}{\prod\limits_{i=0, i\neq j}^{n-1} \left(z_{j}^{(k)} - z_{i}^{(k)}\right)}$$

$$(j = 0,1,...,n-1)$$

この式(DK式)を使ってn個の解を求める方法をデュラン・ケル ナー(Durand-Kerner)法(もしくはワイヤストラス法)*と呼ぶ

DK式は z_j が解 α_j に近いことを前提としているので初期値 $z_j^{(0)}$ の選び方が重要



*ワイヤストラスが1891年に開発していたけど,それを知らずに デュランとケルナーがそれぞれ1960年と1966年に独自開発 61

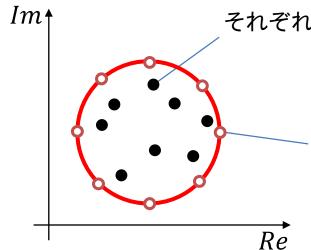
アバース(Aberth)の初期値*

$$z_j^{(0)} = -\frac{c_1}{n} + r \exp\left\{i\left(\frac{2\pi}{n}j + \frac{\pi}{2n}\right)\right\}$$

円の中心

初期値の配置間隔(rad)

j=0,1,...,n-1, rは複素平面上でn個の解をすべて包むような円の半径, iはインデックスではなくここでは虚数($\sqrt{-1}$)



それぞれの黒点は複素解 $\alpha_i = x_i + iy_i$ をプロットしたもの

全点を含む半径rの円上に等間隔に初期値設定

円の中心 = 解の重心

$$\frac{\alpha_0 + \alpha_1 + \dots + \alpha_{n-1}}{n} = -\frac{c_1}{n}$$

・ 配置間隔 : $\frac{2\pi}{n}$, 配置オフセット: $\frac{\pi}{2n}$ ($\frac{3}{2n}$ とする場合も)

半径rはどうやって決める?

アバースの方法による半径rの計算方法*

$$z = w - c_1/n$$
と置くと $P(w) = w^n + c_2'w^{n-2} + \cdots + c_{n-1}'w + c_n' = 0$ $c_i' \neq 0$ ならば以下の方程式が成り立つ

$$S(w) = w^n - |c_2'|w^{n-2} - \dots - |c_{n-1}'|w - |c_n'| = 0$$

注) z^{n-1} の係数 c_1 を基準に w を決めてるので, w^{n-1} の項だけない

S(w) = 0は1個の根rをもち, P(z)の解は半径r内の閉円板に属する (Smithの定理)**

S(w)の係数 c_i' はホーナー法を応用した $\underline{\mathrm{ALORM}}$ で求められ、その根は 2分法やニュートン法を用いれば求められる

(例えば, $r^{(0)} = \max_{k=2,\dots,n} (m|c_k|/|c_0|)^{\frac{1}{k}}$ から探索(mは係数 c_k で0でないものの個数)***)

^{*}O. Aberth, "Iteration methods for finding all zeros of a polynomial simultaneously", Math. Comput. 27, pp.339-344, 1973.

^{**}これによって半径がなぜ求まるかは,山本哲朗,数値解析入門,サイエンス社の付録Aあたりが参考になる

^{***}小澤一文,"Durand-Kerner法の効率的な初期値の簡単な設定方法",日本応用数理学会論文誌, 3(4), pp451-464, 1993.

DK式とアバース(Aberth)の初期値の組み合わせ

Aberthの初期値:
$$z_j^{(0)} = -\frac{1}{n} \frac{c_1}{c_0} + r \exp\left\{i\left(\frac{2\pi}{n}(j-1) + \frac{\pi}{2n}\right)\right\}$$

$$\mathrm{DK式}: \quad z_j^{(k+1)} = z_j^{(k)} - \frac{P\left(z_j^{(k)}\right)}{\prod\limits_{i=0, i\neq j}^{n-1} \left(z_j^{(k)} - z_i^{(k)}\right)}$$
 $(j=0,1,\dots,n-1)$

 \underline{A} berthの初期値 $z_j^{(0)}$ を使って \underline{DK} 式で $z_j^{(k)}$ を更新していく方法



アバースの初期値のコード例

```
// 半径算出のための方程式の係数
                                   S(w) = w^n - |c_2'|w^{n-2} - \dots - |c_n'|
 (Appendix参照)
                                   の係数計算
// 多項式S(w)の係数
vector<double> b(cd.size());
b[0] = abs(cd[0]);
for(int i = 1; i <= n; ++i) b[i] = -abs(cd[i]);
                                       ニュートン法(多項式の係数を
// Aberthの初期値の半径をニュートン法で算出
double r = r0;
                                       引数にしたもの)でS(w)の根
newton(b, n, r, max_iter, eps);
                                       (半径r)を求める
// Aberthの初期値
                                       complex型についてはAppendix参照
complexf zc = -c[1]/(c[0]*(double)n); \leftarrow
for(int j = 0; j < n; ++j){
   double theta = (2*RX PI/(double)n)*j+RX PI/(2.0*n);
   z[j] = zc+r*complexf(cos(theta), sin(theta));
                        Z_iの初期値の計算、オイラーの公式から
                        \exp(i\theta) = \cos\theta + i\sin\thetaとして計算している
```

DK式によるzの更新

```
z_j^{(k+1)} = z_j^{(k)} - \frac{P(z_j^{(k)})}{\frac{n-1}{2}}
```

```
vector<complexf> zp;
complexf f, df;
int k;
for(k = 0; k < max_iter; ++k){</pre>
   zp = z;
   // DK式の計算
   for(int j = 0; j < n; ++j){</pre>
                                                  DK式のために
       f = func(z[j], c, n);
                                                  P(z_i)とP'(z_i)を計算
       df = c[0];
       for(int i = 0; i < n; ++i){
           if(i != j) df *= zp[j]-zp[i];
       z[j] = zp[j]-f/df;
                                                  DK式の計算
    // 誤差の算出と収束判定
     (省略)
```

収束判定は $|P(z^{(k)})| < \varepsilon$ で行う

DKA法の実行結果例1

許容誤差 $\varepsilon = 1 \times 10^{-6}$

```
r = 1.75488
x0(0) = 1.66899 + 0.542287i
                                 アバースの方法による
x1(0) = 1.07455e-16 + 1.75488i,
                                 半径と初期値の計算結果
x2(0) = -1.66899 + 0.542287i
x3(0) = -1.03149 + -1.41973i
x4(0) = 1.03149 + -1.41973i
solutions :
x0 = 0.287248 + 0.938484i
x1 = -0.141792 + 1.32822i
                                 実数解だけでなく
x2 = -0.290911
                                 複素解もすべて求まっている
x3 = -0.141792 + -1.32822i
x4 = 0.287248 + -0.938484i
                           7回の反復で処理終了
iter = 7, eps = 2.05905e-12
```

情報数学C (GC21601)

DKA法の実行結果例2

```
f(x) = x^5 - 3x^4 + 9x^3 - 37x^2 + 80x - 50 = 0

許容誤差\varepsilon = 1 \times 10^{-6}

x = 3.87418
```

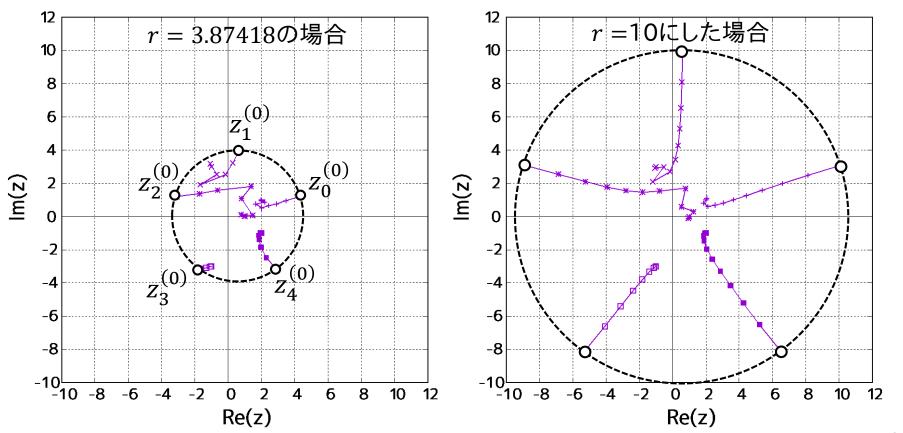
```
r = 3.87418
x0(0) = 4.28456 + 1.19719i
x1(0) = 0.6 + 3.87418i
                                  解の正しさはf(x)に得られた
x2(0) = -3.08456 + 1.19719i
                                   解を代入してみれば分かる
x3(0) = -1.67719 + -3.13428i,
                                  (0に近いほどよい)
x4(0) = 2.87719 + -3.13428i
solutions :
x0 = 2 + 1i \longrightarrow f = -8.94573e-12 (OK)
x1 = -1 + 3i --> f = 0 (OK)
x2 = 1 --> f = -2.42739e-12 (OK)
x3 = -1 + -3i \longrightarrow f = 1.7053e-13 (OK)
x4 = 2 + -1i --> f = -1.63425e-13 (OK)
iter = 9, eps = 1.18566e-11 9回の反復で処理終了
```

初期値からの移動を確認してみよう

$$f(x) = x^5 - 3x^4 + 9x^3 - 37x^2 + 80x - 50 = 0$$

r = 3.87418 アバースの初期値の半径

解 $x = 1, 2 \pm i, -1 \pm 3i$



講義のまとめ

- 今日の問題: f(x) = 0となるxは?
- 求根問題の数値計算での解き方
 - 反復計算で解けるけど効率を上げるにはどうすべきか
- 2分法, ニュートン法
 - 区間を分割する方法と微分を用いる方法
- 収束性と初期値
 - 重根,縮小写像の定理,1次収束と2次収束
- ホーナー法, DKA法
 - 多項式の場合の数値計算法

Appendix

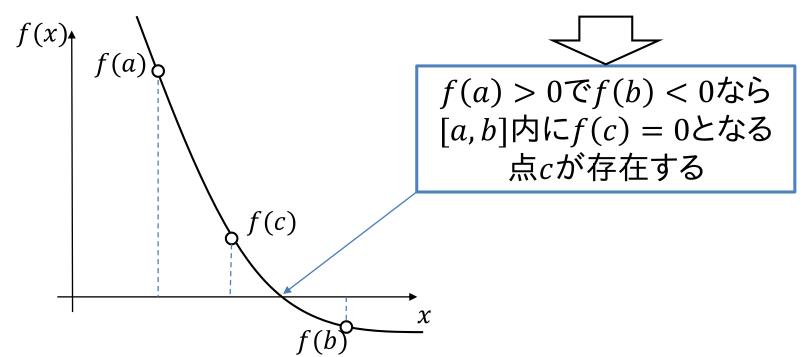
(以降のページは補足資料です)

情報数学C (GC21601) 71

中間値の定理

中間値の定理

閉区間[a,b]で連続な関数f(x)について,f(a) $\neq f$ (b)ならば,f(a)とf(b)の間の任意の数kに対して,f(c) = kとなるc(a < c < b)が存在する



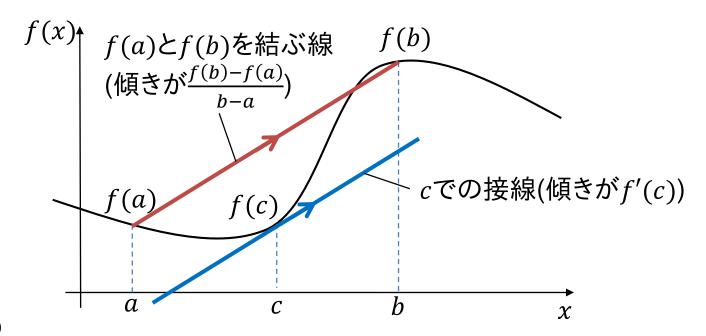
平均値の定理

平均値の定理

区間[a,b]内で微分可能な関数f(x)について,

$$\frac{f(b) - f(a)}{b - a} = f'(c)$$

となるcが、aとbの間に少なくとも1つは存在する



C++のcomplex型について

C++では複素数を扱うための型が用意されている

```
#include <complex>// 複素数
```

```
complex<double> x;
x = complex<double>(1, 2); // 1+2iが代入される
cout << x.real() << " + " << x.imag() << "i" << endl;
complex<double> y, z;
y = complex<double>(2, 3)
z = x + y; // 複素数同士の四則演算も可能
```

なおサンプルプログラムでは以下のように double型の複素数を定義して使っている

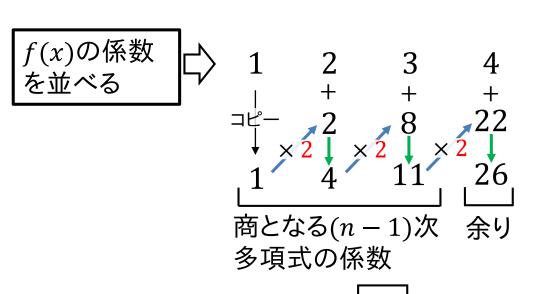
typedef complex<double> complexf; // double型の複素数を定義

情報数学C (GC21601)

組立除法による係数計算

組立除法:多項式を1次式で割ったときの商と余りを求める方法

例)
$$f(x) = x^3 + 2x^2 + 3x + 4$$
 を $(x - 2)$ で割ったら?



この2を持ってくる

青矢印:右上の数字を掛ける

緑矢印:上2つの数字を足す

という意味

$$x^3 + 2x^2 + 3x + 4 = (x - 2)(x^2 + 4x + 11) + 26$$

組立除法による係数計算

組立除法を使って(x-a)に関する多項式に変換

例)
$$f(x) = x^3 + 2x^2 + 3x + 4$$
 を $(x - 2)$ で割ったら,
 $(x - 2)(x^2 + 4x + 11) + 26$
 $\Rightarrow x^2 + 4x + 11$ を更に $(x - 2)$ で割ったら?
 $(x - 2)((x - 2)(x + 6) + 23) + 26$
 $(x + 6)$ を $(x - 2)$ + 8とすると
 $(x - 2)((x - 2)((x - 2) + 8) + 23) + 26$
 $(x - 2)$ を残したまま展開
 $(x - 2)^3 + 8(x - 2)^2 + 23(x - 2) + 26$

(x-2)に関する多項式に分解できた!

P(z)を $z + \frac{c_1}{n} = w$ で割っていけば同様にして $\hat{P}(w)$ を求められる

組立除法による係数計算

組立除法の計算コード例

```
void horner(const vector<double> &a, double b, vector<double> &c, double &rm, int n)
    rm = a[0]; // 最終的に余りになる
                                          (x-b)で割るとして, \times bの処理と上
    c.resize(n);
    for(int i = 1; i < n+1; ++i){
                                          2つの数字を足す処理
       c[i-1] = rm; // 結果の格納
       rm *= b; rm += a[i]; // 組立除法
                                               (z + c_1/n)の設定と c'_0 = c_0
組立除法による係数c_i'の計算コード例
// 半径算出のための方程式の係数
                                                反復計算用に別の配列a[]
vector<complexf> cd(n+1, 1.0); // 係数c'
                                                に係数を入れておく
double c1n = -c[1].real()/n; cd[0] = c[0];
double rm; // 組立除法での余り
vector<double> a(n+1), tmp(n); // 係数格納用の一時的な変数
for(int i = 0; i <= n; ++i) a[i] = c[i].real();</pre>
// zの多項式をz+c1/nで割っていくことでwの多項式の係数を求める
for(int i = n; i > 1; --i){
    horner(a, c1n, tmp, rm, i);
                                                組立除法で出てきた余りが
    cd[i] = rm; a = tmp;
                                                \hat{P}(w)の係数になる
```

77

cd[1] = a[1]+c1n;