神戸市立工業高等専門学校
電気工学科／電子工学科
専門科目「数値解析」

2017.4.21

方程式の根

山浦 剛（tyamaura@riken.jp）

講義資料ページ

- http://climate.aics.riken.jp/members/yamaura/numerical_analysis.html

1変数方程式の根

- 数学的問題 $f(x) = 0$ という方程式を満たすxを考える
  - xが4次以下であれば、解の公式が存在する
  - 一般解を与える公式は存在しない

- 数値計算では、反復計算により根（$f(x) = 0$ の解をこう呼ぶ）を求める
  - $f(x) = g(x)$ を解くことは、$f(x) - g(x) = 0$ を解くことと同値である
    - 任意の方程式は$f(x) = 0$ の形にすることができるので、根を求めることは方程式の解を求めることに等しい
  - $f(x)$ の形が三角関数や指数関数を含んでいたり、偏微分方程式だとしても、近似値を計算することができる
    - ある保存則を満たすような式（$\frac{DA}{Dt} = 0$）を考える場合に適用し、解を求めることもある

1変数方程式の根

- 方程式の根を求める代表的な数値解法は2つ
  - 二分法
    - 中間値の定理を基礎とした求根アルゴリズム
  - ニュートン法
    - 接線を利用した求根アルゴリズム

- その他、求根アルゴリズムは多数ある
  - ハウスホルダー法（ハレー法）、割線法、ブレント法、etc.

2分法

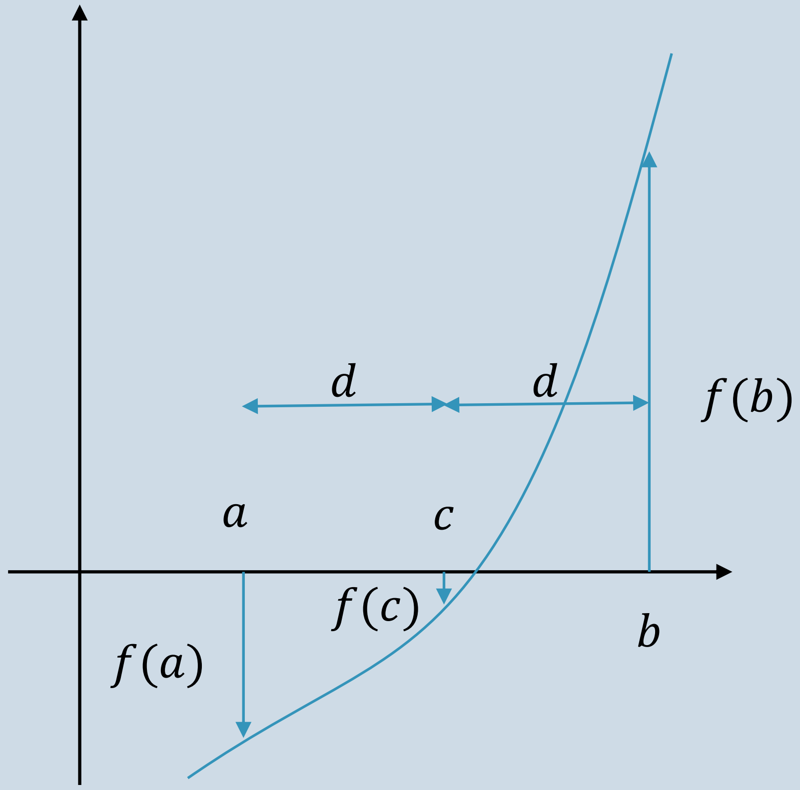
- 2分法の原理
  - $f(x)$が連続で、もし$f(a) < 0, f(b) > 0$となるa, bが存在すれば、$f(\alpha) = 0$となる根αが区間$[a, b]$の間に少なくとも1つ以上存在する
  - 例：　$f(x) = x^3 - 5 = 0$の根を数値計算的に求める
    - 答えは$\sqrt[3]{5}$。これを小数点数で表現する。
    - $1^3 < \left(\sqrt[3]{5}\right)^3 < 2^3$なので、$a = 1, b = 2$と考える。

step	a	b	$c = (a+b)/2$	$c^3 - 5$	
1	1	2	1.5	-1.625	< 0
2	1.5	2	1.75	0.359375	> 0
3	1.5	1.75	1.625	-0.708984375	< 0
4	1.625	1.75	1.6875	-0.19458007812	
5	1.6875	1.75	1.71875	0.07736206055	
6	1.6875	1.71875	1.703125	-0.05985641479	
7	1.703125	1.71875	1.7109375	0.00843954086	

2分法

- 2分法のアルゴリズム
  1. $f(a) < 0, f(b) > 0$ となる初期値a, b を決める
  2. $c := \frac{a+b}{2}, d := \frac{|a-b|}{2}$ を計算
     - $\mathrm{d} < \varepsilon$ ならば3に移る
     - $\mathrm{d} \geq \varepsilon, f(c) < 0$ ならばaにcを代入し（$a := c$）、2を繰り返す
     - $\mathrm{d} \geq \varepsilon, f(c) > 0$ ならばbにcを代入し（$b := c$）、2を繰り返す
  3. c を数値解とする

- このεを“収束判定条件”と呼ぶ
  - $f(c) = 0$ を数学的に完全に満たすcを決定することは困難
  - このとき、数値解cの誤差はε程度

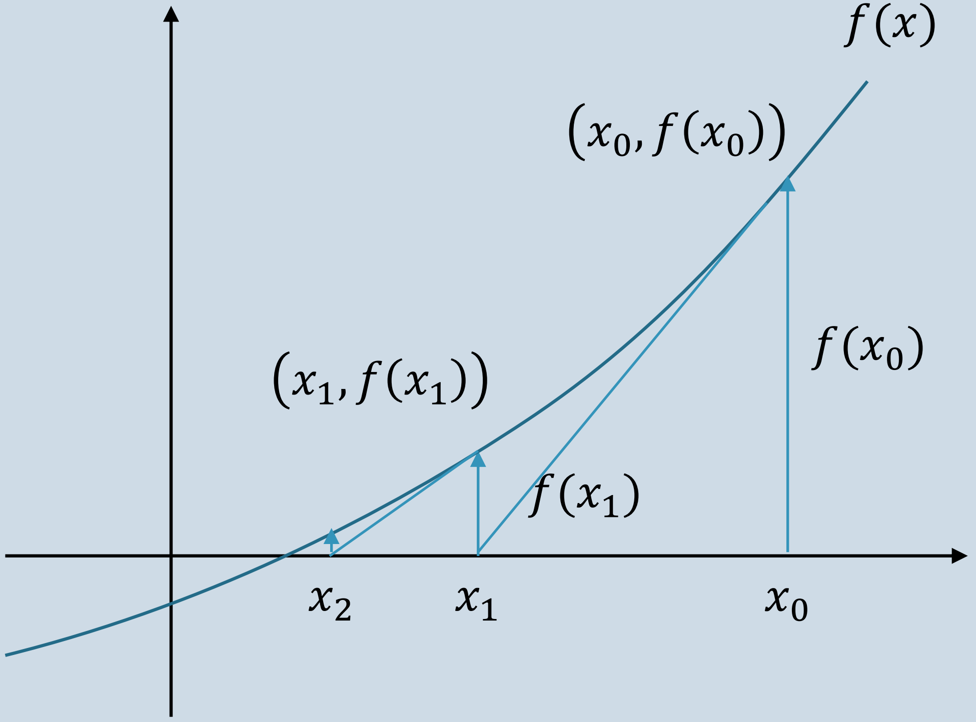


2分法

- 2分法の計算量
  - 何が最も計算しづらいか？
    - 反復計算の中身（前ページの2）が最も演算を実行する箇所
    - 条件判定や四則演算しかないcやdの計算量は大したことはない
    - ここでは$f(c)$の値を求めることが最も大きな計算量となる
  - 計算終了までの計算回数Nを考える
    - 前ページの2を1回実行すると、区間$[a, b]$の幅は半分になる
      - この幅の半分がε未満の大きさになれば計算終了
    - 即ち、$\frac{|a-b|}{2^{N+1}} < \varepsilon$ を満たすNを考える
    - $2^{N+1} > \frac{|a-b|}{\varepsilon}$
    - $N > \log_2\left(\frac{|a-b|}{\varepsilon}\right) - 1$

ニュートン法

- ニュートン法の原理
  - $f(x)$のx_nにおける接線がx軸と交わる点をx_{n+1}とする
    - $f(x_n)=0$ となるx_nを漸次的に求める
  - 点$(x_n, f(x_n))$における接線の傾きは$f'(x_n)$ で表現される
    - この点における接線の式
      - $g(x)=f'(x_n)(x-x_n)+f(x_n)$
    - $g(x)=0$ となるxが次に$f(x)$を求めるときのxになる ⇒ x_{n+1}
      - $0=f'(x_n)(x_{n+1}-x_n)+f(x_n)$
      - $x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$



ニュートン法

- ニュートン法の収束判定条件
  - x_nの真の値との誤差はどの程度なのかを知る確実な方法はない
  - 次善策として、$x_n \approx x_{n+1}$ となっていれば計算終了とする
  - 即ち、誤差ε に対して、$\left|\frac{x_{n+1}-x_n}{x_{n+1}}\right| < \varepsilon$
  - $\varepsilon = 10^{-N}$ とすると、おおよそx_nとx_{n+1} がN桁一致する
- ニュートン法のアルゴリズム
  1. 初期値x_0と許容する誤差εを決める
  2. $c \coloneqq x - \frac{f(x)}{f'(x)}$ を計算
     - $\left|\frac{c-x}{c}\right| < \varepsilon$ ならば3に移り、そうでなければxにcを代入し、2を繰り返す
  3. c を数値解とする

ニュートン法

- ニュートン法の計算例：$f(x) = x^3 - 5 = 0$

step	x	$f(x)$	$f'(x)$	c
1	2	3	12	1.75
2	1.75	0.359375	9.1875	1.71088435374
3	1.71088435374	0.00797282908	8.78137581562	1.70997642892
4	1.70997642892	0.00000423026	8.77205816239	1.70997594668
5	1.70997594668	0.00000000003	8.77205321467	1.70997594668

- 二分法に比べ、少ない計算回数で精度よく計算できている　⇒　収束が速い
- なぜ二分法に比べ、ニュートン法は高速なのか？

ニュートン法

- ニュートン法の精度
  - 根をα、x_nとαの誤差$\varepsilon_n = x_n - \alpha$とする
    - $\varepsilon_{n+1} = x_{n+1} - \alpha = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} - \alpha = \varepsilon_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$
  - テイラー展開により、$f(x_n)$ と$f'(x_n)$ を3次の項まで考える
    - $f(x_n) = f(\alpha) + \varepsilon_n f'(\alpha) + \frac{{\varepsilon_n}^2}{2} f''(\alpha) + \frac{{\varepsilon_n}^3}{6} f'''(\xi_1)$
    - $f'(x_n) = f'(\alpha) + \varepsilon_n f''(\alpha) + \frac{{\varepsilon_n}^2}{2} f'''(\xi_2)$
  - これを、ε_{n+1}に代入
    - $\varepsilon_{n+1} = \varepsilon_n - \frac{f(\alpha)+\varepsilon_n f'(\alpha)+\frac{{\varepsilon_n}^2}{2}f''(\alpha)+\frac{{\varepsilon_n}^3}{6}f'''(\xi_1)}{f'(\alpha)+\varepsilon_n f''(\alpha)+\frac{{\varepsilon_n}^2}{2}f'''(\xi_2)} = \frac{{\varepsilon_n}^2}{2}\frac{f''(\alpha)+\varepsilon_n f'''(\xi_2)-\frac{\varepsilon_n}{3}f'''(\xi_1)}{f'(\alpha)+\varepsilon_n f''(\alpha)+\frac{{\varepsilon_n}^2}{2}f'''(\xi_2)} \approx {\varepsilon_n}^2 \frac{f''(\alpha)}{2f'(\alpha)}$
    - 次の誤差ε_{n+1} がε_nの二乗で小さくなっていくことを示す
    - これらはx_nが十分にαに近く、$f'(\alpha) \neq 0$ の場合にのみ、成立する
    - 重根（ $f'(\alpha) = 0$ ）の場合、根への収束の速さは極端に悪くなる（$\varepsilon_{n+1} \approx \frac{\varepsilon_n}{2}$ ）

ニュートン法

- ニュートン法の短所
  - 関数の形によっては、反復計算を行っても根に収束していかないことがある
  - ニュートン法が成立する条件
    1. 関数が連続である
    2. 関数が単調に変化（単調増加、単調減少）する
       - 微分係数の符号は常に正、または負である
    3. 関数が急激に変化しない
       - $f'(x)$ の値はxに対して概ね同じ
       - $f'(x)$の値が0に近づかない
  - ニュートン法は初期値が根に近ければ、成功する可能性が上がる
    - はじめに二分法である程度根に近い値を求めておき、その後ニュートン法を適用するといった工夫をする

1変数方程式の根

- 代表的な方程式の根の求め方は2つある
- 二分法の特徴
  - 連続であれば、関数の形に依らず、数値的に安定に解くことができる
  - 計算量を予め見積もることができる
  - ニュートン法と比べ、収束が遅い
- ニュートン法の特徴
  - 二分法よりも収束が速い
  - 関数が連続でも、関数の形によっては、根に収束しない可能性がある