

数値解析

第二回 代数方程式の求解

舟木 剛

平成26年10月08日2限

シラバス

- 授業の目的
 - 工学分野でよく用いられる数値計算の算法ならびにそれらの数値的な特性について理解させる。
- 授業計画
 - 数値計算と誤差(1回)
 - 数値計算の必要性ならびに誤差の種類について説明するとともに、行列式とその性質、行及び列の交換などの基本演算、逆行列の定義と求め方について説明する。
 - 代数方程式(2回)
 - 2分法, Newton-Raphson 法, Bailey 法について解説する。また、多変数に対するNewton-Raphson 法と収束に関する留意点について述べる。
 - 連立方程式(3回)
 - Gauss の消去法, Gauss-Jordan の掃き出し法, LU 分解法の手順ならびに計算複雑度について解説する。また, Jacobi 法, Gauss-Seidel 法, SOR 法などの反復法について手順並びに収束条件について解説する。
 - 行列の固有値(3回)
 - 固有値の性質, べき乗法, Householder 法, QR 法について述べる。QR 法の収束定理について解説する。
 - 補間法(2回)
 - 線形補間, Lagrange 補間, Newton 補間, スプライン補間について述べる。多項式補間については算出方法をスプライン補間については3次のスプライン関数の導出方法を説明する。また, 自然なスプライン関数とその特徴について解説する。
 - 関数近似(1回)
 - 最小2乗法による関数の近似について解説する。
 - 数値積分(1回)
 - 台形公式, シンプソンの公式による数値積分について解説する。
 - 常微分方程式(1回)
 - 単区分法である Euler 法, 修正 Euler 法, Runge-Kutta 法ならびに複区分法である Adams-Moulton の予測子・修正子法について解説する。また, 数値不安定性についても解説する。
- 教科書 佐藤・中村共著「よくわかる数値計算」日刊工業新聞社

代数方程式の求解

- n 次代数方程式 $f(x)$

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

– 解を求める $f(x) = 0$

- 解の種類

- 相異なる実数解, 実数の重解
- 相異なる共役複素解, 共役複素数の重解

- 解析解

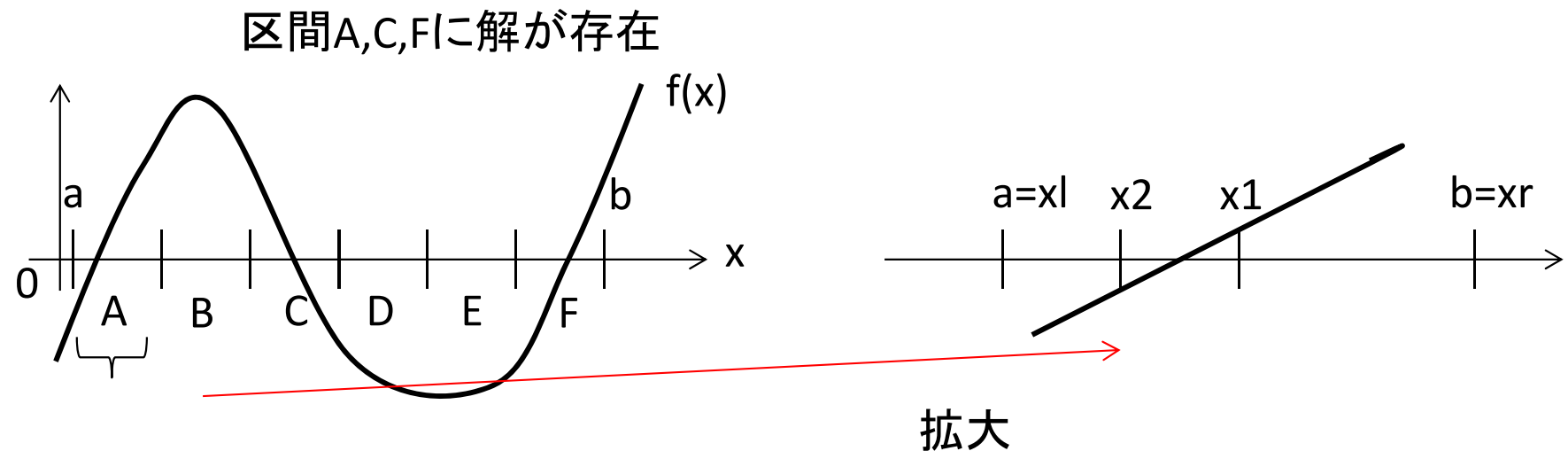
- 2次方程式 → 解の公式
- 3次方程式 → カルダノの公式
- 4次方程式 → フェラリの公式
- 5次以上の方程式 → 解の公式は無い

代数方程式の求解

- 超越方程式
 - 例 $f(x) = e^x - \sin x - 2$
 - 解析解は無い
- 解析解の無い場合
 - 数値解を求める(近似解を真値に近づける)
 - 収束計算による近似解の求解
 - 2分法, ニュートン法等
 - 近似精度と収束に要する反復回数とのトレードオフ

2分法

- 実数解の求解に適用可能
- 区間内 $[a, b]$ で連続な関数 $f(x)$
 - $f(a)f(b) < 0$ を満足すれば $f(x) = 0$ の解が1個以上存在

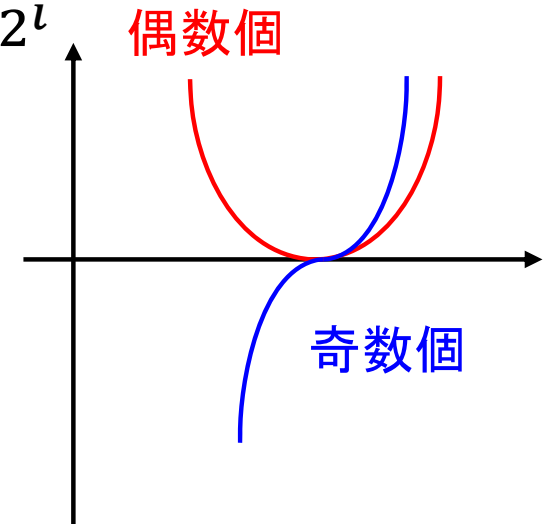


2分法

- 解が存在する区間 $[a, b]$ に対する $f(x) = 0$ の近似解を求める
 - 左端 $x_l (= a)$, 右端 $x_r (= b)$ の中点 $x_1 = \frac{x_l + x_r}{2}$
 - $f(x_1) = 0$ の時, 解は $x = x_1 \rightarrow$ 終了
 - $f(x_l)f(x_1) < 0$ の時, 解は (x_l, x_1) に存在
 - $x_{l2} = x_l, x_{r2} = x_1$ とする
 - $f(x_r)f(x_1) < 0$ の時, 解は (x_1, x_r) に存在
 - $x_{l2} = x_1, x_{r2} = x_r$ とする
 - 新たな中点を $x_2 = \frac{x_{l2} + x_{r2}}{2}$ とする \rightarrow 繰り返し

2分法

- 繰り返し*i*回目での解の存在する範囲 $\frac{b-a}{2^i}$
 - $f(x) = 0$ の解に漸近する
- 重解
 - 奇数個 $\circ \{f(x_l)f(x_r) < 0\}$
 - 偶数個 $\times \{f(x_l)f(x_r) > 0\}$
- 繰り返し計算の終了 → 収束判定
 - 収束判定条件
 - $|x_{i+1} - x_i| \leq \varepsilon$ または $|f(x_{i+1})| \leq \varepsilon$
 - 収束判定指数 ε
 - ε を小さい値に設定(関数に応じて)
 - 中点の更新が有効桁の末尾より小さくなる条件でも可



ニュートン法

- 連続かつ微分可能な方程式の求解
 - 特殊な場合を除く

- 点 $(x_0, f(x_0))$ での接線

- $y = f'(x_0)(x - x_0) + f(x_0)$

- 初期値 x_0
- 傾き $f'(x_0)$

- 接線が $y = 0$ と交わる点 x_1

- $0 = f'(x_0)(x_1 - x_0) + f(x_0)$

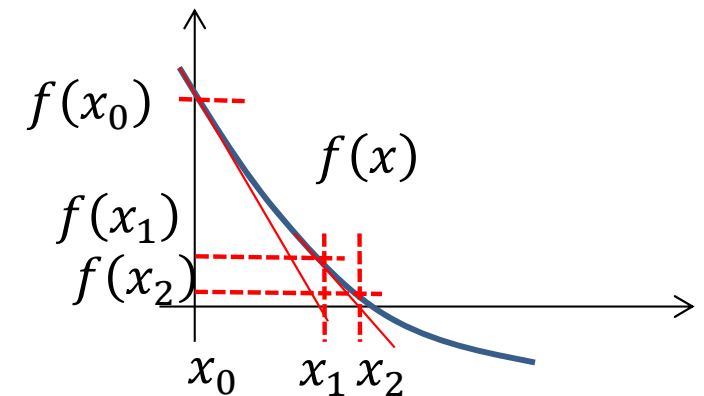
$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

- 繰り返し $x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$ ($i = 1, 2, \dots$)

- x_{i+1} は $f(x) = 0$ の解に漸近する

- » 収束判定 $|x_{i+1} - x_i| \leq \varepsilon$ または $|f(x_{i+1})| \leq \varepsilon$

- » 解が多数ある場合は、どの解に収束するか分からない



ニュートン法での解の収束

- $f(x) = 0$ の解を a とする。→ $f(a) = 0$
- 接線の解の関数 $F(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$
 - 導関数 $F'(x) = 1 - \frac{f'(x)f'(x) - f(x)f''(x)}{(f'(x))^2} = \frac{f(x)f''(x)}{f'(x)^2}$
 - 導関数の導関数 $F''(x) = \frac{[f'(x)f'''(x) + f(x)f''''(x)]f'(x)^2 - f(x)f''(x)2f'(x)f''(x)}{[f'(x)f''(x) + f(x)f'''(x)]f'(x)^2 - 2f(x)f''(x)^2} = \frac{f'(x)^2}{f'(x)^3}$
 - 解 a に対する関数, 導関数の値
 - $F(a) = a - \frac{f(a)}{f'(a)} = a$
 - $F'(a) = \frac{f(a)f''(a)}{f'(a)^2} = 0$
 - $F''(a) = \frac{[f'(a)f'''(a) + f(a)f''''(a)]f'(a) - 2f(a)f''(a)^2}{f'(a)^3} = \frac{f'(a)f''(a)f'(a)}{f'(a)^3} = \frac{f''(a)}{f'(a)}$

ニュートン法での解の収束

- ニュートン法で求めた解の誤差

- $x_{i+1} - a = F(x_i) - a$

- 関数 $F(x)$ の解 a の周りでのテイラー展開

- $$F(x) = F(a) + (x - a)F'(a) + \frac{(x-a)^2 F''(a)}{2!} + \dots$$
$$= a + (x - a)0 + \frac{(x - a)^2 f''(a)}{2! f'(a)} + \dots$$
$$= a + \frac{(x - a)^2 f''(a)}{2! f'(a)} + \dots$$

- $$x_{i+1} - a = F(x_i) - a = \frac{(x_i - a)^2 f''(a)}{2! f'(a)} + \dots$$
$$\cong \frac{(x_i - a)^2 f''(a)}{2! f'(a)}$$

- 誤差が1ステップ前の誤差の二乗に比例して小さくなる → 二次収束

- 反復回数が多くなると解析解に急速に漸近する

- $\left| \frac{f''(a)}{f'(a)} \right|$ が小さいほど収束が速い

ニュートン法での解の収束

- 関数 $f(x)$ の解 a が m 重根の場合

- $f(x) = (x - a)^m g(x)$ と書ける。 $g(a) \neq 0$

- 導関数 $f'(x) = m(x - a)^{m-1}g(x) + (x - a)^m g'(x)$
 $= (x - a)^{m-1} \{mg(x) + (x - a)g'(x)\}$

- 接線の解の関数 $F(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$ とする。

- $F(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)} = x - \frac{(x-a)^m g(x)}{(x-a)^{m-1} \{mg(x) + (x-a)g'(x)\}} = x - \frac{(x-a)g(x)}{mg(x) + (x-a)g'(x)}$

- $F(a) = a - \frac{(a-a)g(a)}{mg(a) + (a-a)g'(a)} = a$

- 導関数 $F'(x) = 1 - \frac{\{g(x) + (x-a)g'(x)\} \{mg(x) + (x-a)g'(x)\} - (x-a)g(x) \{mg'(x) + g'(x) + (x-a)g''(x)\}}{\{mg(x) + (x-a)g'(x)\}^2}$

- $= 1 - \frac{\{g(x) + (x-a)g'(x)\} \{mg(x) + (x-a)g'(x)\} - (x-a)g(x) \{(m+1)g'(x) + (x-a)g''(x)\}}{\{mg(x) + (x-a)g'(x)\}^2}$

- $F'(a) = 1 - \frac{\{g(a) + (a-a)g'(a)\} \{mg(a) + (a-a)g'(a)\} - (a-a)g(a) \{(m+1)g'(a) + (a-a)g''(a)\}}{\{mg(a) + (a-a)g'(a)\}^2}$

- $= 1 - \frac{g(a)mg(a)}{\{mg(a)\}^2} = 1 - \frac{1}{m}$

ニュートン法での解の収束

- 導関数の導関数 $F''(x) = \frac{-1}{\{mg(x) + (x-a)g'(x)\}^4} \times$

$$\left[\begin{array}{l} \{g'(x) + g'(x) + (x-a)g''(x)\}\{mg(x) + (x-a)g'(x)\} \\ +\{g(x) + (x-a)g'(x)\}\{mg'(x) + g'(x) + (x-a)g''(x)\} \\ -\{g(x) + (x-a)g'(x)\}\{(m+1)g'(x) + (x-a)g''(x)\} \\ -(x-a)g(x)\{(m+1)g''(x) + g''(x) + (x-a)g'''(x)\} \end{array} \right] \times \{mg(x) + (x-a)g'(x)\}^2$$

$$- \left[\begin{array}{l} \{g(x) + (x-a)g'(x)\}\{mg(x) + (x-a)g'(x)\} \\ -(x-a)g(x)\{(m+1)g'(x) + (x-a)g''(x)\} \end{array} \right]$$

$$\times 2\{mg'(x) + g'(x) + (x-a)g''(x)\}\{mg(x) + (x-a)g'(x)\}$$
- $F''(x) = \frac{-1}{\{mg(x) + (x-a)g'(x)\}^4} \times$

$$\left[\begin{array}{l} \{2g'(x) + (x-a)g''(x)\}\{mg(x) + (x-a)g'(x)\} \\ -(x-a)g(x)\{(m+2)g''(x) + (x-a)g'''(x)\} \end{array} \right] \times \{mg(x) + (x-a)g'(x)\}^2$$

$$- \left[\begin{array}{l} \{g(x) + (x-a)g'(x)\}\{mg(x) + (x-a)g'(x)\} \\ -(x-a)g(x)\{(m+1)g'(x) + (x-a)g''(x)\} \end{array} \right]$$

$$\times 2\{(m+1)g'(x) + (x-a)g''(x)\}\{mg(x) + (x-a)g'(x)\}$$

ニュートン法での解の収束

$$- F''(a) = \frac{-1}{\{mg(a) + (a-a)g'(a)\}^4} \times \left(\begin{aligned} & \left[\begin{aligned} & \{2g'(a) + (a-a)g''(a)\}\{mg(a) + (a-a)g'(a)\} \\ & - (a-a)g(a)\{(m+2)g''(a) + (a-a)g'''(a)\} \end{aligned} \right] \times \{mg(a) + (a-a)g'(a)\}^2 \\ & - \left[\begin{aligned} & \{g(a) + (a-a)g'(a)\}\{mg(a) + (a-a)g'(a)\} \\ & - (a-a)g(a)\{(m+1)g'(a) + (a-a)g''(a)\} \end{aligned} \right] \\ & \times 2\{(m+1)g'(a) + (a-a)g''(a)\}\{mg(a) + (a-a)g'(a)\} \end{aligned} \right)$$

$$\begin{aligned} - F''(a) &= \frac{-1}{\{mg(a)\}^4} \times \\ & \langle 2g'(a)mg(a)\{mg(a)\}^2 - g(a)mg(a)2(m+1)g'(a)mg(a) \rangle \\ &= \frac{-2g'(a)}{\{mg(a)\}^4} \times \langle \{mg(a)\}^3 - g(a)(m+1)\{mg(a)\}^2 \rangle \\ &= \frac{-2g'(a)}{\{mg(a)\}^4} \times \left\langle \{mg(a)\}^3 - \frac{m+1}{m}\{mg(a)\}^3 \right\rangle = \frac{-2g'(a)}{mg(a)} \times \left\langle 1 - \frac{m+1}{m} \right\rangle \\ &= \frac{2g'(a)}{m^2g(a)} \end{aligned}$$

ニュートン法での解の収束

- 関数 $F(x)$ の解析解 a の周りでのテイラー展開

$$\begin{aligned} - F(x) &= F(a) + (x-a)F'(a) + \frac{(x-a)^2 F''(a)}{2!} + \dots \\ &= a + (x-a) \left(1 - \frac{1}{m}\right) + \frac{(x-a)^2}{2!} \frac{2g'(a)}{m^2 g(a)} + \dots \\ &= a + (x-a) \frac{m-1}{m} + \frac{(x-a)^2 g'(a)}{m^2 g(a)} + \dots \end{aligned}$$

- ニュートン法で求めた解の誤差

$$\begin{aligned} - x_{i+1} - a &= F(x_i) - a = (x-a) \frac{m-1}{m} + \frac{(x-a)^2 g'(a)}{m^2 g(a)} + \dots \\ &\cong (x-a) \frac{m-1}{m} \end{aligned}$$

- 誤差が1ステップ前の誤差の1乗に比例して小さくなる → 1次収束
 - $m=1$ の場合, 二次収束となる(一次の項は消える)
 - m が大きいほど収束おそい

2分法とニュートン法の比較

	2分法	ニュートン法
解の収束	遅い	速い
重解	偶数乗根 ×	○
求解	区間内の解は必ず求まる	初期値によって解が求まらないことがある
	近接解も求まる	複素解も求まる
算術	関数の微分不要	関数の微分必要
誤差	誤差の計算容易	丸め誤差少ない
課題	解のある区間の特定を要する	収束判定が困難なケース有

ニュートン法

連立方程式の求解

- 変数の x, y の二つの関数 $\begin{cases} f(x, y) = 0 \\ g(x, y) = 0 \end{cases}$
 - 近似解 x_i, y_i 近傍でのテイラー展開
 - $\begin{cases} f(x_i + \delta_x, y_i + \delta_y) = f(x_i, y_i) + f_x \delta_x + f_y \delta_y + \dots \\ g(x_i + \delta_x, y_i + \delta_y) = g(x_i, y_i) + g_x \delta_x + g_y \delta_y + \dots \end{cases}$

ただし, $f_x = \frac{\partial f(x,y)}{\partial x}, f_y = \frac{\partial f(x,y)}{\partial y}, g_x = \frac{\partial g(x,y)}{\partial x}, g_y = \frac{\partial g(x,y)}{\partial y}$
 - 二階微分以降を無視して, 交点を求める
 - $\begin{cases} 0 = f(x_i + \delta_x, y_i + \delta_y) \cong f(x_i, y_i) + f_x \delta_x + f_y \delta_y \\ 0 = g(x_i + \delta_x, y_i + \delta_y) \cong g(x_i, y_i) + g_x \delta_x + g_y \delta_y \end{cases}$
 - $\begin{cases} -f(x_i, y_i) = f_x \delta_x + f_y \delta_y \\ -g(x_i, y_i) = g_x \delta_x + g_y \delta_y \end{cases}$

ニュートン法

連立方程式の求解

- $$-\begin{bmatrix} f(x_i, y_i) \\ g(x_i, y_i) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_x \delta_x + f_y \delta_y \\ g_x \delta_x + g_y \delta_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_x & f_y \\ g_x & g_y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta_x \\ \delta_y \end{bmatrix}$$
- $$\begin{bmatrix} \delta_x \\ \delta_y \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} f_x & f_y \\ g_x & g_y \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} f(x_i, y_i) \\ g(x_i, y_i) \end{bmatrix} = \frac{-1}{f_x g_y - f_y g_x} \begin{bmatrix} g_y & -f_y \\ -g_x & f_x \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f(x_i, y_i) \\ g(x_i, y_i) \end{bmatrix}$$

$$-\delta_x = -\frac{f(x_i, y_i)g_y - g(x_i, y_i)f_y}{f_x g_y - f_y g_x}, \delta_y = -\frac{-f(x_i, y_i)g_x - g(x_i, y_i)f_x}{f_x g_y - f_y g_x}$$

行列計算

- 新しい変数を $\begin{cases} x_{i+1} = x_i + \delta_x \\ y_{i+1} = y_i + \delta_y \end{cases}$ とする。

- 収束判定 $\begin{cases} |x_{i+1} - x_i| \leq \varepsilon_x \text{ または } \left| \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1}} \right| \leq \varepsilon_x \\ |y_{i+1} - y_i| \leq \varepsilon_y \text{ または } \left| \frac{y_{i+1} - y_i}{y_{i+1}} \right| \leq \varepsilon_y \end{cases}$
 - $\varepsilon_x + \varepsilon_y \leq \varepsilon$ でも可
 - 収束判定指数 $\varepsilon_x, \varepsilon_y$