工学基礎実験実習 レポート文書作成技術1
— ニュートン法に関する実験 —

右田剛史

平成 27 年 2 月 18 日

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 1 では，曲線 $y = f(x)$ と x 軸が交わっており，この交点の x 座標が x^* である．

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]．

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

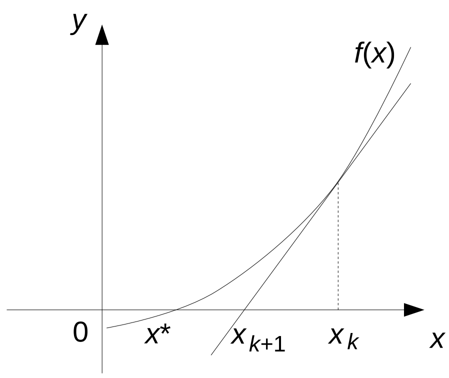

図 1: ニュートン法の幾何学的解釈

```
$ bc -l
x=1.1
x=x-(x-1)*(x+1)*(x+1)/(3*x*x+2*x-1);x
1.00869565217391304348
x=x-(x-1)*(x+1)*(x+1)/(3*x*x+2*x-1);x
1.00007464079119238665
x=x-(x-1)*(x+1)*(x+1)/(3*x*x+2*x-1);x
1.00000000557062401616
x=x-(x-1)*(x+1)*(x+1)/(3*x*x+2*x-1);x
1.00000000000000003104
x=x-(x-1)*(x+1)*(x+1)/(3*x*x+2*x-1);x
1.00000000000000000001
```

図 2: 実験結果 1

図 1 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 $k \to \infty$ 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，極限値 x^* との誤差 r_k を次のように定義する．

$$r_k := x_k - x^* \tag{2}$$

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].

$$\begin{aligned} r_{k+1} &= r_k - \left.\frac{r_k f' + r_k^2 f''/2 + \cdots}{f' + r_k f'' + \cdots}\right|_{x=x^*} \\ &= \left(r_k^2/2\right)\left(f''/f'\right)\Big|_{x=x^*} + O(r_k^3) \end{aligned} \tag{3}$$

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．

$$f(x) = (x-1)(x+1)^2 \tag{4}$$

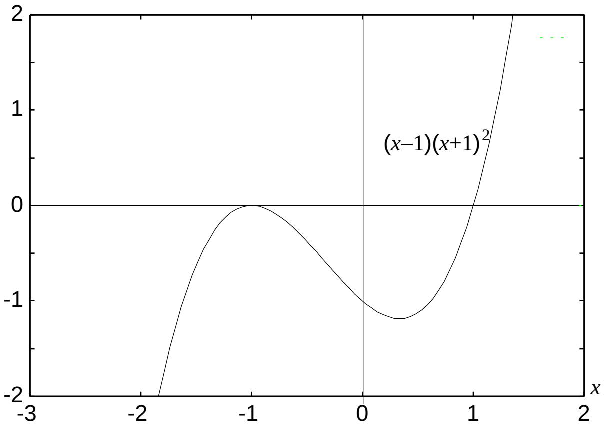

図 3: $(x-1)(x+1)^2$ のグラフ

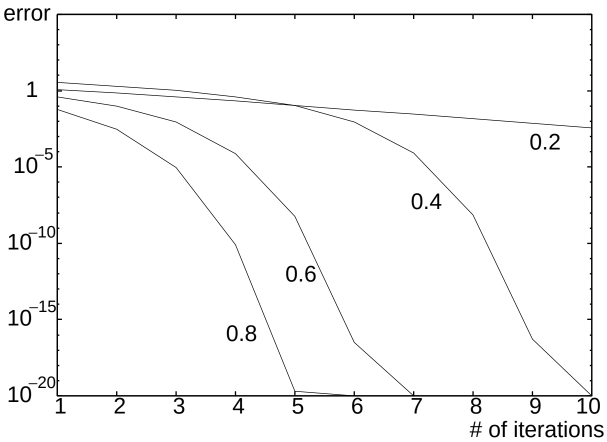

図 4: 反復回数と誤差の関係

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．

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

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 2 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 $-1.0014\cdots$ 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解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で示す．各折れ線付近の数字は初期値を表す． bc の性質上，最後の値は常に 10^{-20} の誤差を含むため，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わかる．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容易に予想できる．

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

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は 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．

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`