

1 非線型方程式の解法 (ニュートン法)

ある種の関数は方程式の解の形で与えられる.

例 1. $\sqrt{a}$ という関数は a に方程式 $x^2 - a = 0$ の (正の) 解を対応させる関数である.

この種の関数の値を求める事は方程式を解く事, 即ち, " $f(x) = 0$ を満たす x を求める事" と同義である. 特に方程式が線形, 即ち $ax + b = 0$ の形をしている時は容易である. 実際 $x = -b/a$ であるから一回の割り算で計算できる¹. 故に真に問題となるのは方程式が非線形の場合である.

しかしながら, 一步線形の世界を外れると事態は急激に悪化する. 例えば代数方程式の場合でさえ 2 次方程式の場合であっても解の記述には平方根が必要であり, 四則演算では解けず, 5 次以上であれば平方根を使った記述さえも不可能である.

1.1 ニュートン法

ニュートン法は非線型方程式の数値解法の一つである.

—— ニュートン法 ——

f が解を含むある区間 $[a, b]$ で

- 二回微分可能
- 単調増で下 (或いは上に) に凸
- f 及び f' が計算可能

を満たす時, 操作

$$x \leftarrow x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

を繰り返す事により $f(x) = 0$ の $[a, b]$ 上の解 (単調性の仮定より唯一) が求まる.

特に代数方程式は適当な区間でこの要件を満たし, ニュートン法が適用できる. ニュートン法は次の定理により正当化される.

定理 1. f を区間 $[a, b]$ 上で二回微分可能な関数で次を満たすものとする.

- $f(a) < 0 < f(b)$
- $f'(x) > 0$ for all $x \in [a, b]$ (単調増加性)

¹例え一次方程式であっても多次元, 即ち連立方程式の場合, 特に次元が大きい時はそれほど容易ではない. しかしながら, それらの問題は計算回数の多さと其れによる誤差の蓄積によるものであり, ここでの難しさとはまた異なる性質のものである.

- $f''(x) > 0$ for all $x \in [a, b]$ (下に凸)

この時, $x_0 := b$ から

$$x_{i+1} := \Phi(x_i), \quad \Phi(x) := x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

によって帰納的に定義される数列 $\{x_i\}_{i=1}^{\infty}$ は収束列となり, その収束先 $x_{\infty} := \lim_{i \rightarrow \infty} x_i$ は区間 $[a, b]$ における方程式 $f(x) = 0$ の一意な解となる. 即ち

$$f(x_{\infty}) = 0$$

を満たす.

Proof. まず数列 $\{x_i\}$ が収束することを示す.

x_i を中心としたテイラー展開によりある $y_i \in [x_i, x_{i+1}]$ が存在して

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + \frac{f''(y_i)}{2}(x_{i+1} - x_i)^2$$

である. 右辺の第一項と第二項の和が 0 である様に x_{i+1} を定めたことに注意すれば, 凸性の仮定 ($f''(y_i) > 0$) より

$$f(x_{i+1}) = \frac{f''(y_i)}{2}(x_{i+1} - x_i)^2 > 0$$

を得る. $x_0 = b$ より $f(x_0) > 0$ でもあるので任意の i について $f(x_i) > 0$. これと単調性の仮定 ($f'(x_i) > 0$) により

$$x_i > x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} = x_{i+1}$$

即ち単調性 $x_0 > x_1 > x_2 > x_3 > \dots$ が示せる.

ところで中間値の定理より $f(c) = 0$ なる $c \in (a, b)$ が存在する. $f(x_i) > 0$ と f の単調増加性より $x_i > c$ であるから

$$c < \dots < x_{i+1} < x_i < \dots < x_0,$$

即ち, $\{x_i\}$ は単調減少で下に有界な数列となるので収束列である.

次に $f(x_{\infty}) = 0$ を示す. 特に, 漸化式

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

において, 片々 $i \rightarrow \infty$ とすれば

$$0 = -\frac{f(x_{\infty})}{f'(x_{\infty})}$$

$x_i \in [a, b]$ より $x_{\infty} = \lim_{i \rightarrow \infty} x_i \in [a, b]$ であるから仮定より $f'(x_{\infty}) \neq 0$. よって $f(x_{\infty}) = 0$ が得られた. f の単調増加性より $[a, b]$ における f の解は一意であるので $c = x_{\infty}$ であり, 一意解である. $\square$

例 2. $\sqrt{a}$ を求める事を考えよう. $f(x) := x^2 - a = 0$ の解を求めればよい. $f'(x) = 2x$, $f''(x) = 2$ であるので, 例えば $[\frac{\sqrt{a}}{2}, \frac{a+1}{2}]$ で定理 1 の仮定が満たされている. この時

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

であるから, 我々は

$$x_0 := \frac{a+1}{2}, \quad x_i := \frac{x_{i-1}^2 + a}{2x_{i-1}}$$

を繰り返すことによって無限に $\sqrt{a}$ に近い値を求めることが出来る².

note

$f(x) = x^2 - a$ の時は $b (= x_0)$ は $\sqrt{a}$ より大きな計算可能な数であれば何でも良い. 例えば $b = \min\{a, 1\}$ でも良い. 実際はできるだけ小さなものから始めるほうが収束が早い. 二乗の増減表を書けば $\sqrt{a} < \frac{a+1}{2} < \min\{a, 1\} (a \neq 1)$ であることが分かる.

問 1. 定理 1 が $f''(x) < 0 (x \in [a, b])$ とした時も $x_0 := a$ とすれば成り立つ事を証明せよ.

問 2. ニュートン法により $\sqrt{2}$ を求めよ. (x_2 を計算せよ)

問 3. ニュートン法により $\sqrt[3]{2}$ を求めよ. ($b = x_0 = \frac{x+2}{3}$ とし, $\Phi(x)$ の具体的な形を求め, x_2 を求めよ.)

1.2 打ち切り誤差

無限に計算を繰り返すことは不可能であるので我々は有限回数で操作を打ち切る, この時生じる誤差を打ち切り誤差と言う. 打ち切り誤差は明らかに繰り返し回数に依存する. 計算の量 (この場合繰り返し回数に比例している) に対する誤差の減少速度はそのアルゴリズムの”良さ”の一つの指標となる. ニュートン法はこの点できわめて優れている.

ニュートン法の打ち切り誤差について次の様な評価が出来る

命題 1. 定理 1 の f の二回導関数が区間 $[a, b]$ で有界ならば $\{x_i\}$, x_∞ について, ある $A > 0$ が存在して

$$|x_i - x_\infty| \leq A|x_{i-1} - x_\infty|^2$$

また, ある $B > 0$, $q < 1$ が存在して

$$|x_i - x_\infty| \leq Bq^{2^i}$$

²無限に時間をかければ

note

この収束はきわめて早い, 実際 $i \rightarrow \infty, q < 1$ の時

$$i^{-1} > i^{-2} > i^{-3} > \dots > q^i > q^{i^2} > q^{i^3} > \dots > q^{2^i}$$

である.

Proof.

$$\begin{aligned} x_i - x_\infty &= x_{i-1} - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} - x_\infty \\ &= \frac{-1}{f'(x_{i-1})} \{f(x_{i-1}) + f'(x_{i-1})(x_\infty - x_{i-1})\} \end{aligned}$$

右辺の $\{ \}$ の中に x_{i-1} を中心としたテイラー展開

$$f(x_\infty) = f(x_{i-1}) + f'(x_{i-1})(x_\infty - x_{i-1}) + f''(y_{i-1})(x_{i-1} - x_\infty)^2 \quad (y_{i-1} \in [x_\infty, x_{i-1}])$$

を代入すれば,

$$\begin{aligned} x_i - x_\infty &= \frac{-1}{f'(x_{i-1})} \{f(x_\infty) - f''(y_{i-1})(x_{i-1} - x_\infty)^2\} \\ &= \frac{f''(y_{i-1})}{f'(x_{i-1})} (x_{i-1} - x_\infty)^2 \end{aligned}$$

よって

$$|x_i - x_\infty| \leq A |x_{i-1} - x_\infty|^2$$

$$\text{但し } A := \frac{\sup_{y \in [a, b]} f''(y)}{\inf_{y \in [a, b]} f'(y)} > 0.$$

特に $A|x_{i_0} - x_\infty| < 1$ なる i_0 がとれるので

$$\begin{aligned} A|x_i - x_\infty| &\leq (A|x_{i-1} - x_\infty|)^2 \\ &\leq (A|x_{i_0} - x_\infty|)^{2^{i-i_0}} \end{aligned}$$

よって $q := \sqrt[2^{i_0}]{A|x_{i_0} - x_\infty|}$, $B := 1/A$ とおけば $q < 1$ で

$$|x_i - x_\infty| \leq Bq^{2^i}$$

□

我々は目標の関数 $g(a) = f_a^{-1}(0)$ ではなく, 近似値を与える関数 $\hat{g}(a) := \Phi^n(a)$ を計算するので, どの程度の質の近似値を要求するかを明確にしなければ計算すべき関数 $\hat{g}$ を確定できない.

許容誤差 e の $g(a)$ の近似値を得るためには $n \geq n_0 := \min\{k \mid |\Phi^k(a) - g(a)| < e\}$ とすればよい, この時 $|g(a) - \Phi^n(a)| < e$ である.³

³我々は未だ $g(a)$ の値を知らないので $\min\{k \mid |\Phi^k(a) - g(a)| < e\}$ 自体は求められない. そこで $n \geq n_0$ で n_0 に近いもので代用する. 例 4 を見よ.

例 3. ニュートン法については, 打ち切り誤差の評価より許容誤差 e に対して必要な反復回数は

$$n_0 \leq \log_2(\log_q e - \log B)$$

で抑えられる.

例 4. $\sqrt{a}$ を許容誤差 e で求めたい時, 例えば $n := \min\{k \mid (x_k - e)^2 < a\}$ とすれば良い.⁴ この時, 手順は次の様なものになる

```
x <- (1+a)/2
do{
  x <- (x+a/x)/2
}while( (x-e)*(x-e) > a )
output x
```

問 4. ニュートン法により許容誤差 0.001 の精度で $\sqrt{2}$ を求めよ.

問 5. 例 4 の手順をプログラムにし, 実行してみよ.

2 縮小写像の原理と反復法

ニュートン法の原理を考察すれば Φ が“縮む”操作であると言う事が本質である事がわかる. この原理を抽出した物が縮小写像の原理であり, この様な原理に従うアルゴリズムを反復法と言う. 一般に反復法は計算速度に優れ, 例えば (非常に高い次元の) 多次元線型方程式の解放にも反復法を用いた物がある.

定義 1. 数列 $\{x_i\}$ が $n, m \rightarrow \infty$ のとき $|x_m - x_n| \rightarrow 0$ となるときのコーシー列であると言う.

定義 2. ある距離空間において任意のコーシー列が収束列となる時, その距離空間は完備であると言う.

例 5. $\mathbb{R}$, $[a, b]$, $[a, \infty)$, $[\infty, b)$, $\mathbb{R}^n$, $\mathbb{R}^n$ の閉部分集合等は (通常のユークリッド距離によって) 完備である.

定義 3. 距離空間 X から自身への写像 $\Phi: X \rightarrow X$ が, ある $q < 1$ について

$$|\Phi(x) - \Phi(y)| \leq q|x - y| \quad \text{for any } x, y \in X$$

を満たす時, Φ は縮小写像であると言う.

⁴常に $0 < \sqrt{a} \leq x_k$ なることに注意すれば

$$(x_k - e)^2 < a \Leftrightarrow x_k - e < \sqrt{a} \Leftrightarrow x_k - \sqrt{a} < e \Leftrightarrow |x_k - \sqrt{a}| < e$$

例 6. $[\varepsilon, \infty)$ において $\Phi(x) = \frac{1}{2} \left\{ x + \frac{a}{x} \right\}$ は縮小写像である. 実際 $x, y \in [\varepsilon, \infty)$ について

$$|\Phi(x) - \Phi(y)| = \left| \frac{1}{2} \left(1 - \frac{a}{xy} \right) (x - y) \right| \leq \frac{a}{2\varepsilon^2} |x - y|$$

定理 2 (不動点定理). 完備な距離空間上の連続な縮小写像 Φ について次の性質がある

1. $\Phi(x) = x$ なる点が一意的に存在する.(不動点という)
2. 任意の点 x_0 に対し, $x_i := \Phi(x_{i-1})$ によって定義される数列は Φ の不動点に収束する.

例 7. 例 6 において不動点は $\sqrt{a}$.

Proof. まず不動点の一意性を示す. $\Phi(x) = x$ かつ $\Phi(y) = y$ とすると, 縮小写像であることを用いれば

$$|x - y| = |\Phi(x) - \Phi(y)| \leq q|x - y|$$

$q < 1$ であるので $|x - y| = 0$, よって $x = y$.

次に収束と不動点の存在を示す. 数列 $\{x_i\}$ の定義より

$$|x_{i+1} - x_i| = |\Phi(x_i) - \Phi(x_{i-1})| \leq q|x_i - x_{i-1}|$$

であるから $|x_{i+1} - x_i| \leq q^i |x_1 - x_0|$, よって $n < m$ について

$$|x_m - x_n| \leq \sum_{i=n}^{m-1} |x_{i+1} - x_i| \leq \sum_{i=n}^{m-1} q^i |x_1 - x_0| = \frac{q^n - q^m}{1 - q} |x_1 - x_0|.$$

上式より $n, m \rightarrow \infty$ のとき $|x_m - x_n| \rightarrow 0$ となるので $\{x_i\}$ コーシー列, よって完備性より収束列である. また, Φ の連続性より

$$\Phi(\lim_{i \rightarrow \infty} x_i) = \lim_{i \rightarrow \infty} \Phi(x_i) = \lim_{i \rightarrow \infty} x_{i+1} = \lim_{i \rightarrow \infty} x_i$$

よって $\lim_{i \rightarrow \infty} x_i$ は Φ の不動点. □