

6 非線形方程式の数値解法

6.1 非線形方程式の解法の概要

非線形方程式

$$f(x) = 0 \quad (6.1)$$

の解 $x = a$ を求めることを考える．いま，関数 $f(x)$ が多項式の場合に，式 (6.1) を代数方程式，そうでない場合を超越方程式と一般によぶ．

この解は一般には解析的には求まらないため，数値計算によって求める必要がある．数値計算においては，必ず誤差を含むため，厳密に $f(x) = 0$ を求めることは難しい．そのため，

$$|f(x)| \leq \delta \quad (6.2)$$

を満たす $x = a$ を近似解とすることになる．ここで， δ は計算の精度と要求される解の精度によって定まる値である．

数値計算の手法としてはニュートン法（あるいはニュートン・ラフソン法）と呼ばれる手法が中心となる．ここでは，単純な二分法の説明を行った後に，ニュートン・ラフソン法について述べる．

6.2 二分法

いま，連続な関数上のある区間 $[ab]$ の間に $f(x) = 0$ を満たす解 $x = x_s$ がただひとつ存在することがわかっているものとする．このとき，左の端点 $x_l = a$ と右の端点 $x_r = b$ とで $f(x_l)$ と $f(x_r)$ は必ず異なる正負の符号を持つ．すなわち，この符号を $\text{sign}(f(a))$, $\text{sign}(f(b))$ とすると， $\text{sign}(f(a)) \neq \text{sign}(f(b))$ である．

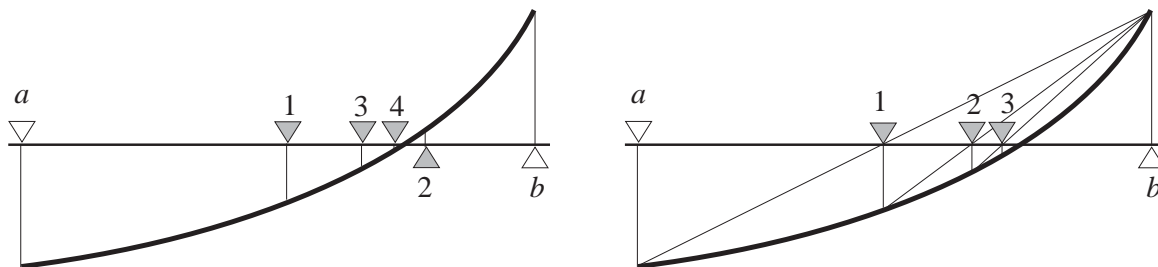


図 6.1: 二分法 (左) と線形逆補間法 (右)

これに対して，2点の中間点 $x_m = (x_l + x_r)/2$ を求め，その符号 $f(x_m)$ に対して，

STEP-1: $x_m \leftarrow (x_r + x_l)/2$ とし， $|f(x_m)| \leq \delta$ のとき， x_m を解として終了．

STEP-2: $\text{sign}(f(x_m)) = \text{sign}(f(a))$ のとき，解は $[x_m x_r]$ にあるため， $x_l \leftarrow x_m$ として，STEP-1 に戻る．

STEP-3: $\text{sign}(f(x_m)) \neq \text{sign}(f(a))$ のとき，解は $[x_l x_m]$ にあるため， $x_r \leftarrow x_m$ として，STEP-1 に戻る．

こうしたやり方で解の存在する区間を段階的に限定していく方法を二分法 (bisection method) という．二分法では一回の操作で区間は半分となるので， $2^{10} = 1024 \sim 10^3$ で，10回の操作で精度が約3桁向上する．

二分法では区間 $[x_l, x_r]$ の中点を区間分割の点として選んだが，2点 $(x_l, f(x_l))$ と $(x_r, f(x_r))$ とを結んだ線分と $x = 0$ との交点を分割点として選ぶ線形逆補間法 (method of inverse linear interpolation) がある．線形逆補間法は二分法よりも平均的には早く解に収束することが知られている．

6.3 ニュートン法

非線形な関数 $f(x)$ も局所的にみると一次関数で近似できると考えると，一次近似された関数 $f_{(1)}(x) = ax + b = 0$ の解は容易に求めることができる．そうして得られた解 x_n は真の解とはならないが， x_{n+1}, x_{n+2}, \dots と反復して求めていくことで真の解へと収束していくことが期待される．こうしたアプローチで非線形方程式 $f(x) = 0$ の解を求める手法をニュートン (Newton) 法またはニュートン・ラフソン (Newton-Raphson) 法とよぶ．

いま，連続で一次微分可能な関数 $f(x)$ を考える．ある点 x_n での導関数 $f'(x_n)$ が与えられるとき， $(x_n, f(x_n))$ を通り，傾きが $f'(x_n)$ の直線の方程式は，

$$y = f'(x_n)(x - x_n) + f(x_n) \quad (6.3)$$

で与えられる．これを $f(x)$ の近似式と見なすと， $f(x) = 0$ の近似解は上の式の $y = 0$ とする解であるから，

$$x = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad (6.4)$$

で与えられる．ここで得られた解を x_{n+1} とし， $(x_{n+1}, f(x_{n+1}))$ の点を通る一次式で近似することを繰り返して，真の解へと接近していくことを $|x_{n+1} - x_n| < \epsilon$ を満たすまで行う．

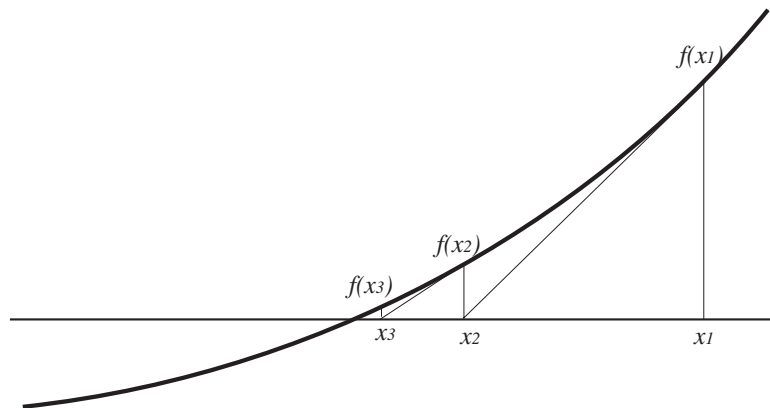


図 6.2: ニュートン・ラフソン法での収束過程

【練習問題 6-1】

$f(x) = x^3 + 2x^2 - 5x + 6$ のグラフを描き，ニュートン・ラフソン法での求解の過程を図示せよ．ただし，初期解として， $x_1 = -3$ の場合と， $x_1 = 1$ の場合を考えてみよ．

6.4 収束の条件

先の演習問題で見たとおり，ニュートン・ラフソン法は関数 $f(x)$ と初期値の取り方によっては解へ収束しないことがある．ここでは，それについて少し詳しく述べていくことにする．

式 (6.4) で示されるような、解の漸化式を $F(x)$ とおく。

$$x_{n+1} = F(x_n) \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (6.5)$$

これが解 α に収束したとすると、 $\alpha = F(\alpha)$ である。これにより、

$$x_{n+1} - \alpha = F(x_n) - F(\alpha) = (x_n - \alpha)F'(\theta_n) \quad (6.6)$$

ただし、 θ_n は x_n と α によって決まる区間のある値である (平均値の定理より)

いま、考える x に対して $|F'(x)|$ の上限を K とすると、上の式は

$$|x_{n+1} - \alpha| \leq |x_n - \alpha|K \quad (6.7)$$

が成り立つ。これを漸化式に適用すると、

$$|x_{n+1} - \alpha| \leq |x_n - \alpha|K \leq |x_{n-1} - \alpha|K^2 \leq \dots \leq |x_1 - \alpha|K^n \quad (6.8)$$

となる。この数列 $x_n - \alpha$ は真の値との差を表しているので、0 に収束することが必要であり、そのための条件は $K < 1$ なることである。すなわち、

$$|F'(x)| < 1 \quad (6.9)$$

が数列 $\{x_n\}$ が α に収束するための条件であり、逐次近似法の収束条件と呼ばれる。

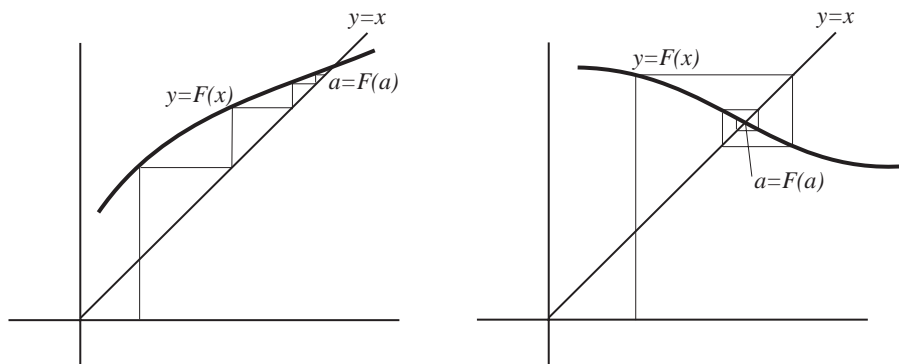


図 6.3: $F(x)$ と収束の過程

また、解 α へと収束する数列 $\{x_n\}$ が、

$$|x_{n+1} - \alpha| \leq |x_n - \alpha|^m M \quad (6.10)$$

と書けるとき、数列 $\{x_n\}$ は α に m 次収束するという。

6.5 連立非線形方程式

これまで、一変数での方程式を考えてきたが、ここでは多変数の連立方程式を考えることにする。すなわち、

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, \dots, x_m) &= 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_m) &= 0 \\ &\dots \dots \\ f_m(x_1, x_2, \dots, x_m) &= 0 \end{aligned}$$

これを以下の式にまとめて記すこととする。

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad (6.11)$$

これに対するニュートン・ラフソン法での漸化式は以下のように導かれる。

$$\mathbf{x}^{(n+1)} = \mathbf{x}^{(n)} + \delta\mathbf{x} \quad (6.12)$$

$$= \mathbf{x}^{(n)} - \mathbf{J}(\mathbf{x}^{(n)})^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}^{(n)}) \quad (6.13)$$

ここで、 $\mathbf{J}(\mathbf{x}^{(n)})$ は $\mathbf{x}^{(n)}$ におけるヤコビ行列であり、その内容は、

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}^T} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_m} \\ \frac{\partial f_2(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(\mathbf{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2(\mathbf{x})}{\partial x_m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_{m-1}(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_{m-1}(\mathbf{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_{m-1}(\mathbf{x})}{\partial x_m} \\ \frac{\partial f_m(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_m(\mathbf{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_m(\mathbf{x})}{\partial x_m} \end{bmatrix} \quad (6.14)$$

ここで補正量 $\delta\mathbf{x}$ を

$$\delta\mathbf{x} = -\mathbf{J}(\mathbf{x}^{(n)})^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}^{(n)}) \quad (6.16)$$

により求めると、ヤコビ行列の逆行列を求めることになるため、一般には前回の講義で述べた線形方程式の数値解法により

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}^{(n)})\delta\mathbf{x} = -\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(n)}) \quad (6.17)$$

を満足する $\delta\mathbf{x}$ を求めるのが適切である。

連立非線形方程式は一般に複数の解をもつ。そのため、ニュートン法で求められる解は、反復を行う際の初期解に依存する。したがって、初期解は求めたい解の近傍に選ぶ必要があり、解のおおまな性質を理解していることが重要となる。

【練習問題 6-2】

次の連立方程式に関してヤコビ行列を求めよ。

$$f_1(x, y) = 0.1x^2 + y - 5 = 0$$

$$f_2(x, y) = x^2 + y^2 - 100 = 0$$

参考文献

川崎晴久著：C&FORTRAN による数値解析の基礎，共立出版 ISBN4-320-02643-8