

E1 数値計算

【ニュートン法】

代数方程式 $f(x)=0$ の解 c の近似値を計算する手段である。

初期値として x_0 をとる。適当な条件の下で

$$\text{漸化式 } x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} (n=0,1,2,\dots)$$

によって定まる数列 $\{x_n\}$ は c に収束することを利用する。

ニュートン法の計算のアリゴリズムを $f(x)=x^2-2$, $x_0=2$ の場合で接線と x 軸との交点 x_1, x_2 を描いて説明せよ。

$\varepsilon > 0$ を与えて、 $|x_{n+1} - x_n| < \varepsilon$ となる n を得るまで繰り返すプログラムを作れ。

次の方程式の解の近似値を求めよ。

$$x^2 - 2 = 0$$

$$x^3 + x - 1 = 0$$

$$x^5 - 4x^3 + 3x - 25 = 0$$

$$\cos x = x$$

$$x^2 \sin x = 0.6$$

$$\cos(\sin(x^2 + 1)) = 0.7$$

【シンプソンの公式】

関数 $f(x)$ の a から b までの定積分 $S = \int_a^b f(x)dx$ を次のように近似計算する。

区間 $[a, b]$ を $2n$ 等分し、 $h = \frac{b-a}{2n}$ とおく。分点を左から $x_0, x_1, x_2, \dots, x_{2n}$ と

する（ただし $x_0 = a, x_{2n} = b$ ）。対応する関数値を $y_0, y_1, y_2, \dots, y_{2n}$ とおく。隣り合う 2 個ずつの小区間 $[x_{2k-2}, x_{2k}](k=1, 2, \dots, n)$ において、3 点

$$(x_{2k-2}, y_{2k-2}), (x_{2k-1}, y_{2k-1}), (x_{2k}, y_{2k})$$

を通る 2 次関数 $y = ax^2 + bx + c$ で $f(x)$ を近似させる。このとき

$$\begin{aligned} \int_{x_{2k-2}}^{x_{2k}} f(x)dx & \approx \int_{x_{2k-2}}^{x_{2k}} (ax^2 + bx + c)dx \\ & = \frac{h}{3}(y_{2k-2} + 4y_{2k-1} + y_{2k}) \end{aligned}$$

である。ここで $k=1, 2, \dots, n$ をわたらす総和として

$$S = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}[y_0 + 4\{y_1 + y_3 + \dots + y_{2n-1}\} + 2\{y_2 + y_4 + \dots + y_{2n-2}\} + y_{2n}]$$

という近似式が成り立つ。これを利用して次の定積分の近似値を計算せよ。

$$\int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx = \pi$$

$$G(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^x e^{-\frac{x^2}{2}} dx \quad (\text{正規分布})$$

$x = 0.1, 0.2, \dots, 2.0$ の値を計算すること。

$$2G(1.0) = 0.6827, 2G(2.0) = 0.9545$$

幅 120m の川の深さ (m) を流れに垂直に 10m 毎に測ったら次のようであった。

0	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100	110	120
2.0	3.2	4.1	4.5	6.6	7.2	7.4	6.3	5.0	2.2	1.9	1.7	0.0

この川の断面積を推計せよ。

【ガウス-ルジャンドルの積分公式】

定積分の近似値を求める台形公式やシンプソンの公式は ニュートン-コーツ型といわれる。その形は

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=1}^n w_k f(x_k)$$

で、 x_k ($k=1,2,\dots,n$) は閉区間 $[a,b]$ 内の点で、 w_k ($k=1,2,\dots,n$) は適当な数で、 $f(x_k)$ に掛ける重みである。

ここでは、 n 個の分点 x_k ($k=1,2,\dots,n$) をある n 次多項式 (ルジャンドル多項式) の零点とし、重み w_k ($k=1,2,\dots,n$) をある方法で与えることにする。

定積分 $\int_a^b f(x)dx$ は $t = \frac{2x-(a+b)}{b-a}$ と変換することで、積分区間が $[-1,1]$

の積分 $\int_{-1}^1 g(t)dt$ に置き換えられる。さて、ルジャンドルの多項式 $P_n(x)$ は

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \quad (n=0,1,2,\dots)$$

で与えられていて、 $P_n(x)$ は $[-1,1]$ で連続で、 $(-1,1)$ に n 個の異なる零点をもつ。それらを x_k ($k=1,2,\dots,n$) とし、重みを

$$w_k = \frac{2(1-x_k^2)}{(nP_{n-1}(x_k))^2} \quad (k=1,2,\dots,n)$$

とおく。これは、クリストフェル数と呼ばれる。こうして

$$\int_{-1}^1 g(x)dx \approx \sum_{k=1}^n w_k g(x_k)$$

が成り立つ。これがガウス-ルジャンドルの積分公式である。 $g(x)$ が $2n-1$ 次

以下の多項式のときは、正確な値を与える。

$$\int_{-1}^1 \frac{2}{1+x^2} dx \text{ の近似値を } P_5(x), P_6(x) \text{ を用いてガウスの公式で計算すること。}$$

【補間多項式】

$n+1$ 個の点 $(a_0, b_0), (a_1, b_1), \dots, (a_n, b_n)$ を通る x の多項式関数 $p_n(x)$ を作ること。

連立方程式による方法

$p_n(x) = c_0 + c_1x + \dots + c_nx^n$ とおいて係数 $c_0, c_1, \dots, c_n$ を
連立一次方程式 $p_n(a_i) = b_i \ (i = 0, \dots, n)$ から求める。

ラグランジュの補間公式

$$l_j(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^n \frac{x - a_i}{a_j - a_i} \quad (\text{補間係数}) \quad \text{とおいて} \quad p_n(x) = \sum_{j=0}^n b_j l_j(x)$$

ニュートンの補間公式

$f[i] = b_i \ (i = 0, 1, \dots, n)$ とおく。

2 点 $(a_i, b_i), (a_{i+1}, b_{i+1})$ から 1 階差分商を $f[i, i+1] = \frac{b_{i+1} - b_i}{a_{i+1} - a_i}$ で定義し、

k 階差分商を $f[i_0, i_1, \dots, i_k] = \frac{f[i_1, \dots, i_k] - f[i_0, \dots, i_{k-1}]}{a_{i_k} - a_{i_0}}$ とおく。

これを係数として

$$p_n(x) = f[0] + f[0,1](x - a_0) + f[0,1,2](x - a_0)(x - a_1) + \dots \\ + f[0,1, \dots, n](x - a_0)(x - a_1) \cdots (x - a_n)$$

`InterpolationPolynomial[{ {a0,b0}, {a1,b1}, ..., {an,bn} }, x]`

次の点を通る x の多項式関数を求めよ。

$(-1, 2), (3, 5)$	直線
$(-1, 2), (1, 4), (3, 5)$	放物線
$(-1, 2), (1, 4), (3, 5), (5, 3)$	3 次関数
$(-1, 2), (1, 4), (3, 5), (5, 3), (7, 4)$	4 次関数

【連立一次方程式の数値解法】

連立一次方程式

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

は未知数 n が大きいとき、計算量が多くなるので、種々の計算法が考案されている。

ここで係数行列を A 、未知数ベクトルを x 、定数項ベクトルを b とおく。

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

このとき $Ax = b$ を解くことになる。係数行列 A を変形する直接法と未知数ベクトル x を変形する間接法がある。

ガウスの消去法

A と b を並べた拡大係数行列 $(A|b)$ に行基本変形

- ① 1つの行に0でない数をかける。
- ② 1つの行にある数をかけたものを他の行に加える。
- ③ 2つの行を入れ換える。

を施して、 A を上三角行列に変形する（前進消去）。その結果を

$$(A'|b') = \begin{pmatrix} a_{11}' & a_{12}' & \cdots & a_{1n}' & b_1' \\ 0 & a_{22}' & \cdots & a_{2n}' & b_2' \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn}' & b_n' \end{pmatrix}$$

とおく。次に行列 $(A'|b')$ に行基本変形を施して A' が対角行列になるように変形する。

（後退消去）。その結果

$$(A''|b'') = \begin{pmatrix} a_{11}'' & 0 & \cdots & 0 & b_1'' \\ 0 & a_{22}'' & \cdots & 0 & b_2'' \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn}'' & b_n'' \end{pmatrix}$$

となり、ベクトル x が求まる。

LU分解

行列 A を下三角行列 L と上三角行列 U の積に分解する。ここで

$$L = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

とにおいて、 $A = LU$ となるように L と U を定める。未知数 l_{ij} と u_{ij} の数が $n^2 + n$ 個あるので、 n 個を指定して、 L の対角成分をすべて 1 とおいて計算する方法（ドリトルの方法）を使う。

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

一方、 U の対角成分をすべて 1 とおいて計算する方法（クラウトの方法）もある。さて、 $LUx = b$ を解くために $Ux = y$ とおくと、 $Ax = b$ は $Ly = b$ となる。まず y を求め、その結果を用いて x が求められる。

同じ行列 A に対して b が多数あるときに $Ax = b$ を効率的に解くには

```
dat=LUdecomposition[A];
LUBackSubstitution[dat,b]
```

とする。

ヤコビ法

連立一次方程式 $Ax = b$ から、 $x = Bx + c$ を導く。ここで B は係数行列で c は係数ベクトルである。解に対する適当な初期値 $x^{(0)}$ と漸化式

$$x^{(k)} = Bx^{(k-1)} + c$$

によって、 $x^{(k)}$ ($k = 1, 2, \dots$) を計算する。 $\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = \xi$ が求まれば、 ξ は解である。

そのため、 i 番目の式を変形して (a_{ii} は 0 でないとして)

$$x_i = \frac{b_i - (a_{i1}x_1 + \cdots + a_{i,i-1}x_{i-1} + a_{i,i+1}x_{i+1} + \cdots + a_{in}x_n)}{a_{ii}}$$

から

$$x^{(k)} = \begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \\ \vdots \\ x_n^{(k)} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{a_{12}}{a_{11}} & \cdots & -\frac{a_{1,n-1}}{a_{11}} & -\frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & \cdots & -\frac{a_{2,n-1}}{a_{22}} & -\frac{a_{2n}}{a_{22}} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ -\frac{a_{n1}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n2}}{a_{nn}} & \cdots & -\frac{a_{n,n-1}}{a_{nn}} & 0 \end{pmatrix}, \quad c = \begin{pmatrix} \frac{b_1}{a_{11}} \\ \frac{b_2}{a_{22}} \\ \vdots \\ \frac{b_n}{a_{nn}} \end{pmatrix}$$

とする。与えられた微小量 ε (> 0) に対して、漸化式で繰り返し $x^{(k)}$ を求めていき、

$$|x_i^{(k)} - x_i^{(k-1)}| < \varepsilon \quad (i=1, 2, \dots, n)$$

のとき終了させる。

ガウス・ザイデル法

ヤコビ法で、 $x^{(k)}$ を $x^{(k-1)}$ から計算するとき、

$$x_i^{(k)} = \frac{b_i - (a_{i1}x_1^{(k-1)} + \dots + a_{i,i-1}x_{i-1}^{(k-1)} + a_{i,i+1}x_{i+1}^{(k-1)} + \dots + a_{in}x_n^{(k-1)})}{a_{ii}}$$

であるが、 $x_i^{(k)}$ を計算する前に、既に $x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_{i-1}^{(k)}$ は計算されているので、 $x_1^{(k-1)}, x_2^{(k-1)}, \dots, x_{i-1}^{(k-1)}$ の代わりに $x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_{i-1}^{(k)}$ を用いると、ヤコビ法より収束が早まることが期待できる。即ち

$$x_i^{(k)} = \frac{b_i - (a_{i1}x_1^{(k)} + \dots + a_{i,i-1}x_{i-1}^{(k)} + a_{i,i+1}x_{i+1}^{(k-1)} + \dots + a_{in}x_n^{(k-1)})}{a_{ii}}$$

とする漸化式を利用する。

SOR (Successive Over Relaxation) 法

ガウス・ザイデル法で $x^{(k-1)}$ から $\bar{x}^{(k)}$ を計算する。この $\bar{x}^{(k)}$ に適当な重み ω ($1 \leq \omega < 2$) を付けて $x^{(k)} = \omega \bar{x}^{(k)} + (1-\omega)x^{(k-1)}$ とする。収束速度は ω によって変わってくる。

ガウスの消去法を用いて次の連立一次方程式を解け。

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 = 9 \\ 4x_1 + 5x_2 = 17 \\ 2x_1 + 7x_2 - x_3 = 11 \end{cases} \quad \begin{cases} x_1 + x_2 + 2x_3 = 1 \\ 2x_1 + 2x_2 + 7x_3 = 5 \\ x_1 + 6x_2 + 3x_3 = 12 \end{cases}$$

次の行列をLU分解せよ。

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 6 & 3 \\ 2 & 2 & 7 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 4 & 2 & 4 \\ 2 & 5 & 2 \\ 4 & 2 & 5 \end{pmatrix}$$

次の連立方程式の係数行列をLU分解し、それを用いて解け。

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + x_3 + x_4 = -1 \\ 4x_1 + 5x_2 - 2x_3 + 4x_4 = -7 \\ 4x_1 + 3x_2 - 3x_3 + x_4 = -12 \\ 2x_1 + x_2 + x_3 + 3x_4 = 2 \end{cases}$$

次の連立一次方程式をヤコビ法・ガウス-ザイデル法・SOR法で5回まで解き、収束の早さを比較せよ。

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 = 4 \\ x_1 + 2x_2 = 5 \end{cases}, x^{(0)} = \begin{pmatrix} 1.5 \\ 2.5 \end{pmatrix}, \quad \omega = 1.2, \quad 1.5, \quad 1.8$$

$$\begin{cases} 2x_1 + 2x_2 + x_3 = 3 \\ 4x_1 + 7x_2 + 2x_3 = 12 \\ 2x_1 + x_2 + 4x_3 = 4 \end{cases}, x^{(0)} = \begin{pmatrix} -1.6 \\ 2.2 \\ 1.6 \end{pmatrix}, \quad \omega = 1.2$$

$$\begin{cases} 8x_1 + 2x_2 + x_3 + x_4 = -15 \\ 4x_1 + 5x_2 - 2x_3 + 4x_4 = -5 \\ 4x_1 + 3x_2 - 3x_3 + x_4 = -12 \\ 2x_1 + x_2 + x_3 + 3x_4 = 2 \end{cases}, x^{(0)} = \begin{pmatrix} -2.5 \\ -1.5 \\ 2.5 \\ 2.7 \end{pmatrix}, \quad \omega = 1.2$$

【微分方程式の数値解法】

常微分方程式 $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$ が初期条件 $y(x_0) = y_0$ を満たすとき、未知関数 $y(x)$ の離散近似を求める方法を扱う。 x_0 の近傍 $x_0 + h$ における $y(x_0 + h) = y_1$ の近似値を計算する方法が2変数関数のテーラー展開を利用していろいろ考案されている。

$y(x_0 + h) = y_1$ を初期条件として $y(x_0 + 2h) = y_2$ の近似値が計算され、繰り返すことで $y(x_0 + kh) = y_k$ ($k = 1, 2, \dots, n$) が得られる。これらを基に近似の解曲線が描ける。

オイラー法・改良オイラー法

$y(x_0 + h) = y_1 = y(x_0) + hf(x_0, y_0) + R_2$ から $|h|$ が十分小さいとき、

$$y_1 \cong y_0 + hf(x_0, y_0)$$

という近似式が成り立つ。これをオイラー法という。

次に $y(x_0 + h) = y_1 = y(x_0) + hy'(x_0) + \frac{h^2}{2} y''(x_0) + R_3$ を変形して

$$y_1 \cong y_0 + \frac{h}{2} [f(x_0, y_0) + f(x_0 + h, y_0 + hf(x_0, y_0))]$$

となる。これを改良オイラー法という。

ルンゲ・クッタ法

初期値問題 $y' = f(x, y)$, $y(x_0) = y_0$ に対して、離散近似を行う。

$y(x_0 + h) = y_1 = y_0 + y_0' h + \frac{1}{2!} y_0'' h^2 + \frac{1}{3!} y_0''' h^3 + \dots$ であるから、区間 $(x_0, x_0 + h)$ のいくつかの点における y' を計算し、それらの平均を α とするとき、 $y = y_0 + \alpha$ なる値が上の Taylor 級数とできるだけ多くの項が一致するように定める方法。

$$\alpha_1 = f(x_0, y_0) \cdot h$$

$$\alpha_2 = f\left(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}\alpha_1\right) \cdot h$$

$$\alpha_3 = f\left(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}\alpha_2\right) \cdot h$$

$$\alpha_4 = f(x_0 + h, y_0 + \alpha_3) \cdot h$$

より平均値 $\alpha = \frac{\alpha_1 + 2\alpha_2 + 2\alpha_3 + \alpha_4}{6}$ を作り、 $y_1 = y_0 + \alpha$ とする。

NDSolve による数値計算と解曲線

DSolve で求まらない場合でも、NDSolve により数値解が得られる。更に解が補間関数で得られているので、解曲線のグラフも描くことができる。

例 $y'' + \sin y = 0, y(0) = 0, y'(0) = 1$ を解き、解曲線を描くこと。

```
NDSolve[{y''[t]+y[t]==0, y[0]==0, y'[0]==1}, y, {t,0,10}]
```

と入力して、補間関数を使った解が

```
{y->InterpolatingFunction[{{0.,10.}}, "<>"]}}
```

と得られる。これは次のように Evaluate を用いて

```
Plot[Evaluate[y[t]/.%, {t,0,10}]
```

のグラフが描ける。さらに、例えば $t=1.5$ の関数値は

```
y[1.5]/.%%
```

で得られる。

次の微分方程式の解を指定した範囲で解き、その解グラフを描け。

$$y' = x + y, \quad y(0) = 1 \quad x \in [0, 1]$$

$$(x^2 + 2x)y'' + 20y' + \frac{2}{x^2}y = e^x, \quad y(1) = 1, \quad y'(1) = 1.5 \quad x \in [0.5, 2.5]$$

参考書

数値計算 川上一郎	岩波書店	1989
数値計算法 深尾 毅・渡辺成良	昭晃堂	1982
数値微分積分法 長田直樹	現代数学社	1987
計算による線形代数 神谷紀生・木 栄輔	共立出版	1999