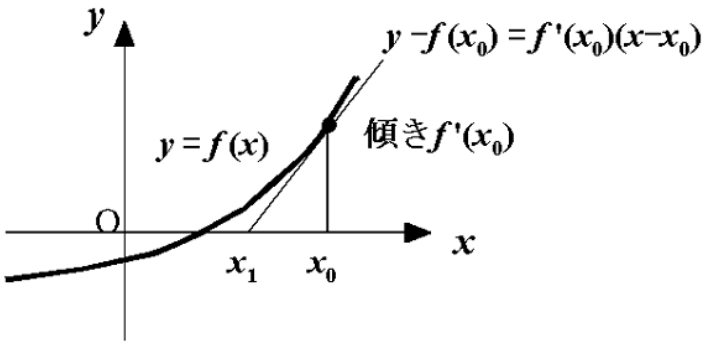
プログラミング演習1

― 課題4 数値解析法 ―

2.2 ニュートン法

ニュートン法は以下の手順で方程式 $f(x)=0$ の解を求める。

1. 初期値x_0を与える。
2. その点での関数値$f(x_0)$と 傾き$f'(x_0)$から x 切片x_1を推定する。
3. x_1を新たな初期値x_0としてこの操作を反復する。



$(x_0, f(x_0))$を通る接線の式

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

においてx 切片では $y = 0, x = x_1$ となるので

$x_1 = x_0 - f(x_0) / f'(x_0)$ ……… (2.1)

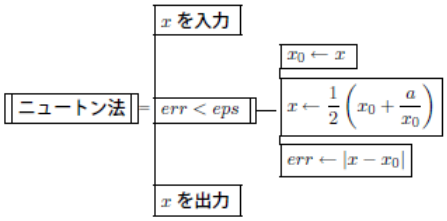
$f(x) = x^2 - a$ のとき、$f'(x) = 2x$ だから

$x_1 = x_0 - (x_0^2 - a) / 2x_0 = (x_0 + a / x_0) / 2$ ……… (2.2)

真野芳久「Pascalプログラミングの基礎」サイエンス社 p.41 のプログラムと 川上一郎「数値計算」岩波書店 p.180 付録3.1のプログラムを合体してCに移植し、手直ししたもの(newton0.c)を以下に示す。ただし、アルゴリズムの核心部分は穴埋めする必要がある。
下線部では scanf関数の代わりにfgets関数とsscanf関数 を使って入力する方法を用いた。→[付録1]
また、リダイレクト出力時にも入力促進メッセージ等がコマンドプロンプトに 出力されるようにfprintf関数を用いて 標準エラー出力(stderr)とした。

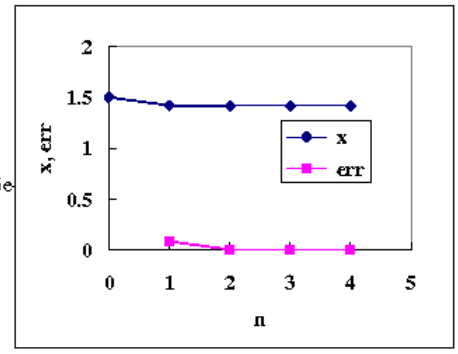
```
 1: /*
 2:     newton.c: ニュートン法
 3:  */
 4: #include <stdio.h> // printf, fgets, sscanf
 5: #include <math.h>  // fabs
 6:
 7: int main(void)
 8: {
 9:     int n = 0;
10:     double a = 2, x, x0, err, eps = 1.0e-10;
11:     char s[128];
12:
13:     fprintf(stderr, " a = "); fgets(s, 128, stdin); sscanf(s, "%lf", &a);
14:     while (a <= 0.0) {
15:         fprintf(stderr, "'a' には正の数を入れてください。¥n");
16:         fprintf(stderr, " a = "); fgets(s, 128, stdin); sscanf(s, "%lf", &a);
17:     }
18:
19:     x = (a + 1.0) / 2.0;
20:     printf("# n, x, err¥n");
21:     printf("%4d, % .15e¥n", n, x);
22:     do {
23:         n++;
24:         x0 = _;
25:         x = _______?_______;
26:         err = _____?_____;
27:         printf("%4d, % .15e, % .15e¥n", n, x, err);
28:     } while (_____?_____);
29:     printf("¥n# sqrt(%e) =  % .15e¥n", a, x);
30:     return 0;
31: }
```

主要部分のアルゴリズムをPADで描くと



″ a = 2″ を入力したときの実行結果とそのグラフは

```
# n     x              err
    0           1.5
    1   1.41666667  0.083333333
    2   1.41421569   0.00245098
    3   1.41421356   2.1239E-06
    4   1.41421356  1.59495E-12

# sqrt(2.000000e+000) =  1.41421356237309e
```



2.3 二元連立非線形方程式（ニュートン法）

n 元連立非線形方程式は一般に

$f_1(x_1, x_2, ..., x_n) = 0,$
$f_2(x_1, x_2, ..., x_n) = 0,$
... ...
$f_n(x_1, x_2, ..., x_n) = 0$

と書くことができる。これをベクトル表記すると

$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$

となる。

このとき、ニュートン法の計算式は

$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_k)$
$= \boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{J}(\boldsymbol{x}_k)^{-1} \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_k)$

となる。ここに、$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x}_k)$ はヤコビ行列と呼ばれ、

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial f_n(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_n(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

であり、また、$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) = -\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})^{-1} \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$ である。

2変数の場合は、逆行列が簡単に求められるので

$$\boldsymbol{J}^{-1}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{J_{11}J_{22} - J_{12}J_{21}} \begin{pmatrix} J_{22} & -J_{12} \\ -J_{21} & J_{11} \end{pmatrix}$$

ここに

$$J_{11} = \frac{\partial f_1(x_1, x_2)}{\partial x_1}, J_{12} = \frac{\partial f_1(x_1, x_2)}{\partial x_2}$$
$$J_{21} = \frac{\partial f_2(x_1, x_2)}{\partial x_1}, J_{22} = \frac{\partial f_2(x_1, x_2)}{\partial x_2}$$

「数値解析」の講義用にWebページで公開してある「連立非線形方程式」を解くプログラム(Newton2.c)を 一部手直ししたものを以下に示す(newton2.c)。このプログラムは

$x^2 + y^2 = 1, \quad y = x^3$

を解くためのものである。仕様は以下のとおり。

1. 入力は初期値(x_0, y_0)のみ。許容誤差は $eps = 10^{-10}$。
2. 出力は途中経過と最終結果。CSV形式に対応。
3. 方程式の左辺の関数2つはおのおの独立に定義。(結果は戻り値で返す。)
4. ヤコビ行列の4つの要素もおのおの独立に定義。(結果は戻り値で返す。)
5. 補正ベクトル$u(x)$計算ルーチンの結果は2つの引数で返す。
6. 2変数ニュートン法ルーチンの計算結果は2つの引数で返す。

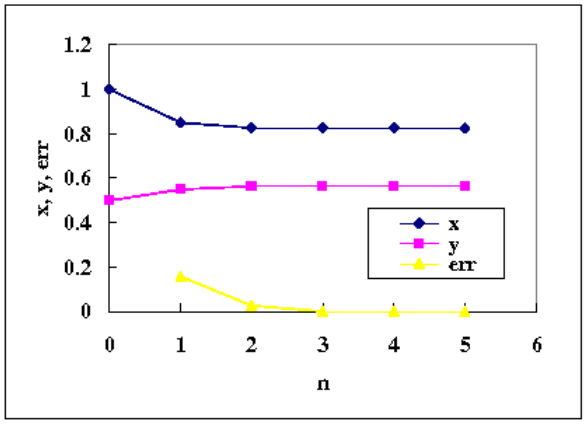
```
1: /*
2:      newton2.c: 2変数のニュートン法
3:      x^2+y^2=1,  y=x^3  -> (x,y)=(0.826,0.5636),(-0.826,-0.5636)
4:  */
5: #include <stdio.h> // printf, fprintf, fgets, sscanf
```

```
#include <math.h>  // hypot(hypotenuse): 直角三角形の斜辺を求める関数

double f1(double x, double y)
{
    return x * x + y * y - 1; //  f1(x,y) = x^2 + y^2 - 1
}
double f2(double x, double y)
{
    return x * x * x - y;     //  f2(x,y) = x^3 - y
}

double J11(double x, double y)
{
    return 2 * x;     //  df1(x,y)/dx = 2x
}
double J12(double x, double y)
{
    return 2 * y;     //  df1(x,y)/dy = 2y
}
double J21(double x, double y)
{
    return 3 * x * x; //  df2(x,y)/dx = 3x^2
}
double J22(double x, double y)
{
    return -1;        //  df2(x,y)/dy = -1
}

int ucalc(double x, double y, double *ux, double *uy)
/*
    u = -J^-1(x)*f(x)
 */
{
    double det;

    det = J11(x, y) * J22(x, y) - J12(x, y) * J21(x, y);
    *ux = -1 / det * (J22(x, y) * f1(x, y) - J12(x, y) * f2(x, y));
    *uy =  1 / det * (J21(x, y) * f1(x, y) - J11(x, y) * f2(x, y));
    return 0;
}

int newton2(double *x, double *y, double eps)
{
    int n=0;
    double x0, y0, ux, uy, err;

    printf("# n, x, y, err¥n");
    printf("%4d, %.15e, %.15e¥n", n, *x, *y);
    do {
        n++;
        x0 = *x; y0 = *y;
        ucalc(*x, *y, &ux, &uy);
        *x += ux; *y += uy;        // x_{k+1} = x_k + u(x_k)
        err = hypot(*x - x0, *y - y0);
        printf("%4d, %.15e, %.15e, %.15e¥n", n, *x, *y, err);
    } while (err >= eps);
    return 0;
}
//  ------------    Main    ------------
int main(void)
{
    double x=1, y=0.5, eps = 1e-10;
    char s[128];

    fprintf(stderr, "# x0 y0 = "); fgets(s, 128, stdin); sscanf(s, "%lf%lf", &x, &y);
    newton2(&x, &y, eps);
    printf("¥n# (x y) = (%.15e %.15e)¥n", x, y);
    return 0;
}
```

"# x0 y0 = 1 0.5" と入力したときの実行結果とグラフは

# n	x	y	err
0	1	0.5	
1	0.85	0.55	0.158113883
2	0.826608312	0.563423517	0.026969647
3	0.826031686	0.563624011	0.000610488
4	0.826031358	0.563624162	3.61939E-07
5	0.826031358	0.563624162	1.17864E-13

(x y) = (8.260313576541869e-001 5.636241621612584e-001)



＜＜＜レポート課題4＞＞＞

上記2つのプログラムを以下の要求に沿って改良せよ。

【1】**2.2** のニュートン法のプログラム newton.c では、$f(x) = x^2 - a$ を仮定した後、手計算した式(2.2)を使っているので、**2.1** の二分法や **2.3** の連立非線形方程式のプログラムのように 方程式の左辺の関数が独立していない。そこで、以下の要求を満たすプログラムを作成せよ。

【1-1】式(2.1)を用い、方程式の左辺関数 $f(x)$ $(= x^2 - a)$ および その導関数 $f'(x)$ を独立させる。ただし、入力変数 a はグローバル変数としてよい。導関数 $f'(x)$ は、プログラムでは例えば $df(x)$ と名づけておく。

【1-2】ニュートン法のアルゴリズムの部分 (newton.c の 20行目～28行目)を newton() と名づけ、main関数から独立させる。

```
double newton(double x, double eps)
{
    ……
    ニュートン法のアルゴリズム
    ……
    return x;
}
```

【1-3】方程式の左辺の関数 $f(x)$ と その導関数の名前をmain関数側で自由に指定できるように、newton() の引数に関数引数用の定義(関数ポインタ)を追加する。

```
double newton(double x, double (*f)(double), double (*df)(double), double eps)
{
    ……
    ニュートン法のアルゴリズム
    ……
    return x;
}
```

【1-4】a の数値をコマンド行から入力する。

なお、実行例として $a = 3$ および 5 の場合について報告せよ。

【2】**2.3** の2変数のニュートン法のプログラム newton2.c は、同じような関数が多くてソースが冗長である。そこで、以下の要求を満たすプログラムを作成せよ。

【2-1】関数f1(), f2()を配列 f[1], f[2]、関数J11()～J22()を2次元配列 J[1][1]～J[2][2] に割り当てることにして、方程式の左辺関数 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$ と そのヤコビ行列 $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})$を おのおの一つのサブルーチン(func(), Jcalc())にまとめること。
ただし、関数の戻り値で渡していた値は引数で受け渡すことにし、手続きの戻り値は終了コード(整数)とする。

```
int func(double x, double y, double f[])
{
    ……
    f[1] = ……;
    f[2] = ……;
    return 0;
}
```

また、Cでの配列の定義は0から始まることに注意し、一つ多めに宣言しておく。配列の数(ND)をヘッダのインクルードの下で以下のように定数マクロで宣言しておくとよい。

```
#define ND 3
```

2次元配列を引数でうまく渡せなかった人は、次善の策として1次元配列にして渡すか、大域変数で引き渡すこと。

【2-2】変数x, yを配列x[1], x[2]、変数ux, uyをu[1], u[2]に割り当てて サブルーチン等の引数の数を減らし、n 変数に移行しやすくする。

【2-3】方程式の左辺の関数 $f(x)$ と その導関数の名前をmain関数側で自由に指定できるように、newton2() の引数に関数引数用の定義(関数ポインタ)を追加する。

なお、実行例として

$x^2 + (y/2)^2 = 1, \quad y^2 = x^2 + 1$

について、第1象限の解を求めてみよ。

【目次】|【1.】|【2.のトップ】|【3.】|【付録1】【付録2】