

3.1 ニュートン法

方程式 $f(x) = 0$ の解を, 適当な初期値 x_0 から出発して, 次の漸化式の極限で求める方法をニュートン (Newton) 法という.

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (3.1)$$

後の3.4節で述べるように, ニュートンは3次方程式 $x^3 - 2x - 5 = 0$ に対してその零点を近似的に求める方法を提案したため, (3.1) はニュートンの名前を冠している.

(3.1) は,

$$\frac{0 - f(x_n)}{x_{n+1} - x_n} = f'(x_n) \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (3.2)$$

のように書き換えられる. すなわち, x_n から x_{n+1} を得る操作は, $x = x_n$ における $f(x)$ の接線の x 切片 x_{n+1} を求めることに等しいといえる (図 3.1). そして, この操作を反復して $f(x) = 0$ の解 α に接近していくので, ニュートン法は反復法の一つである.

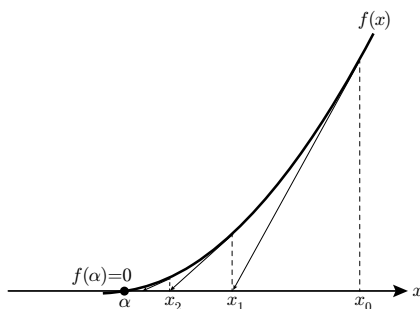


図 3.1 ニュートン法概念図

具体的なアルゴリズムは以下ようになる. 《終了条件》は後述する.

まず, 初期値 x_0 を与える. $f(x_0) = 0$ ならばすでに解が求まっているから, $f(x_0) \neq 0$ とする. $n = 0$ として次の Step 1 から始める.

Step 1 (3.1) より x_n から x_{n+1} を求め, Step 2 に進む.

Step 2 x_{n+1} は《終了条件》を満たしているか？

YES $\Rightarrow$ END

NO $\Rightarrow n := n + 1$ として Step 1 に進む.

END になったら, その時点で反復を終了し, x_{n+1} を所望の近似解とする.

本来は $f(x_n) = 0$ を満たす x_n が求まるまで反復を続けなければならないが, 有限桁しか扱えないコンピュータ上ではそれは望めない. したがって, 一般に “ $= 0$ ” にはならないので, 少し緩めて, 通常は以下のような《終了条件》を課す.

$$\textcircled{1} |f(x_{n+1})| < \varepsilon, \quad \textcircled{2} |x_{n+1} - x_n| < \delta, \quad \textcircled{3} n + 1 > N$$

として,

《終了条件》 $\textcircled{1}$ または $\textcircled{2}$ または $\textcircled{3}$. (3.3)

倍精度計算ならば, 例えば $\varepsilon = 10^{-13}$, $\delta = 10^{-10}$, $N = 20$ とする. しかし, これらの値は関数 f の形状と初期値 x_0 に依存する. より厳しい条件 $\varepsilon = \delta = 10^{-15}$ を課しても, $N = 10$ 程度でうまくいくことも多い.

$\textcircled{1}$ から $\textcircled{3}$ の意味を考える. まず, 反復の途中で運よく $f(x_{n+1}) = 0$ となったら, もちろん x_{n+1} が求める α に他ならないからこれ以上の操作続行は不要である. $\textcircled{1}$ はそんな僥倖^{きやうこう}も含んだ条件となっている. 後述するように, (うまく機能している場合) ニュートン法は正しい桁数が1回の反復で倍になる方法である. したがって, 理想的には初期値に 10^{-1} のオーダーの誤差があったら, 数回の反復で 10^{-16} のオーダーの誤差となるから, 倍精度の場合はこれ以上望めない. しかし, 関数 f の形や初期値の与え方によってはなかなか終了しないことがある. 経験的には数十回の反復で終わらなかったら破綻している可能性を考える. (こういうときは反復がずっと終わらないことが多い.) $\textcircled{2}$ と $\textcircled{3}$ は, そんなときの場合に備えたセーフティーネットとしての条件である. $|x_n|$ の値が大きいきのために, $|x_{n+1} - x_n|$ が相対的に小さいという条件

$$\textcircled{2}' |x_{n+1} - x_n| < \delta |x_n|$$

を $\textcircled{2}$ の代わりに用いることもある.

[問 3.1] $f(x) = x^2 - 2$ として, $f(x) = 0$ の正の解 α にニュートン法で接近してみよう. $x_0 = 2$ とする.

- (1) $f(x) = x^2 - 2$ のときのニュートン法 (3.1) を求めよ.
- (2) (1) の結果を用いて, 以下の空欄を埋めよ.

n	x_n
0	2
1	
2	
3	

- (3) $x_n > 0 \Rightarrow x_{n+1} > 0$ を示せ.
- (4) $x_n^2 > 2 \Rightarrow x_{n+1}^2 > 2$ を示せ.
- (5) $x_n > 0, x_n^2 > 2$ ならば, 数列 $\{x_n\}_{n=0}^\infty$ は単調減少で下に有界であることを示せ. (これより, 数列の極限が存在することがわかる.)
- (6) $x_n > 0, x_n^2 > 2 \Rightarrow 0 < \frac{x_{n+1}^2 - 2}{x_n^2 - 2} \leq \frac{x_0^2 - 2}{4x_0^2}$ を示せ.
- (7) $x_0 = 2$ のとき, 以下を確認せよ.

$$0 < x_n^2 - 2 \leq \frac{1}{8}(x_{n-1}^2 - 2) \leq \frac{1}{8^2}(x_{n-2}^2 - 2) \leq \cdots \leq \frac{1}{8^n}(x_0^2 - 2) = \frac{2}{8^n}$$

(これより, アルゴリズムを途中で終了させずに, 反復操作を無限に継続すれば, $n \rightarrow \infty$ のとき x_n は $\alpha^2 = 2$ を満たす α に収束し, (3) より $\alpha \geq 0$ だから $\alpha = \sqrt{2}$ がわかる.)

問 3.1 は次のように一般化できる.

[問 3.2] 図 3.2 のように, $x \geq 0$ で定義された関数 f が

$$f(0) < 0, \quad f'(x) > 0, \quad f''(x) > 0 \quad (x > 0)$$

を満たしているとする. このとき, $f(\alpha) = 0$ を満たす $\alpha > 0$ が唯一存在することを示せ. また, 方程式 $f(x) = 0$ にニュートン法 (3.1)_{p.64} を適用して得ら

れる数列 $x_0, x_1, \dots$ について, どのような初期値 $x_0 > 0$ から始めても $n \rightarrow \infty$ のとき x_n は真の解 α に収束することを示せ.

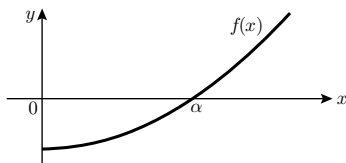


図 3.2 下に凸な関数

◆ 例 3.1 関数 $f(x) = x^3 - x$ の零点は $0, \pm 1$ であるから, 適当な初期値 x_0 から始めれば, 理想的にはいずれかの零点に収束するはずである. しかし, 任意の初期値に対してそれがいえるわけではない. 実際, $x_0 = \frac{1}{\sqrt{5}}$ を初期値にとると, $x_1 = -\frac{1}{\sqrt{5}}$, $x_2 = x_0$ となって, 図 3.3 のように無限ループに陥る. (このように, $x_{n+1} = -x_n$ となる零でないものはこれしかないことはすぐにわかる.)

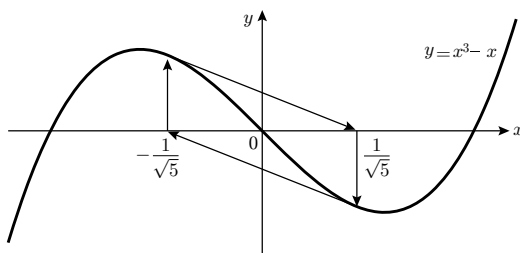


図 3.3 無限ループ

この無限ループは理想であって, 実際はニュートン法の反復計算も $\frac{1}{\sqrt{5}}$ の値自体も丸め誤差の影響を受ける. よって無限ループは実現されずにどれかの零点に収束していきだろうと予想される. ところが, しばしば予想に反して丸め誤差を含めて綺麗に無限ループが実現されてしまうこともある (詳細は [138, 第 9 章]).

この例は面白いが, ニュートン法としては失敗する初期値の選び方である.

他の初期値の例を考えてみよう.

- $x_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$ の場合は $f'(x_0) = 0$ より x_1 が計算できずに破綻する.
- $x_0 = -\frac{1}{2}$ の場合は $x_1 = 1$ より第一歩で成功する.
- $x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}$ となる $x_0 \in \left(-\frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{2}\right)$ の場合は第一歩で破綻する.

3.2 縮小写像の原理

ニュートン法の収束を示すために, 縮小写像の原理を紹介しよう. まずは不動点と縮小写像を定義する.

定義 集合 $I \subset \mathbb{R}$ 上で定義された $\mathbb{R}$ に値をとる写像 F に対して, $x \in I$ が F の不動点であるとは, $F(x) = x$ が成り立つことをいう. また, $I \subset \mathbb{R}$ を閉区間としたとき, I から I への写像 F が縮小写像であるとは, 定数 $0 \leq L < 1$ が存在して,

$$|F(x) - F(y)| \leq L|x - y| \quad (x, y \in I)$$

が成り立つことをいう.

次の命題は縮小写像の原理と呼ばれている.

縮小写像の原理 $I \subset \mathbb{R}$ を閉区間, F を I から I への縮小写像とする. また, 数列 $\{x_n\}_{n=0}^{\infty} \subset I$ を

$$x_{n+1} = F(x_n) \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

のように構成する. このとき, F は I 内にただ一つの不動点をもち, それを α とおくと, 数列 $\{x_n\}_{n=0}^{\infty}$ は α に収束する.

証明 $x_0 \in I$ を任意にとる. このとき,

$$\begin{aligned}
 |x_{n+1} - x_n| &= |F(x_n) - F(x_{n-1})| \\
 &\leq L|x_n - x_{n-1}| \leq \cdots \leq L^n|x_1 - x_0|
 \end{aligned}$$

を得る. これより, $m > n$ に対して,

$$\begin{aligned}
 |x_m - x_n| &\leq (L^{m-1} + L^{m-2} + \cdots + L^n)|x_1 - x_0| \\
 &= \frac{L^n - L^m}{1 - L}|x_1 - x_0| \\
 &< \frac{L^n}{1 - L}|x_1 - x_0| \rightarrow 0 \quad (n \rightarrow \infty)
 \end{aligned}$$

が成り立つ.

したがって, $\{x_n\}_{n=0}^\infty$ はコーシー列となるので, ある $\alpha \in I$ に収束する. と
 ころで, $\lim_{y \rightarrow x} F(y) = F(x)$ が成り立つから写像 F は連続である. これより,

$$F(\alpha) = F\left(\lim_{n \rightarrow \infty} x_n\right) = \lim_{n \rightarrow \infty} F(x_n) = \lim_{n \rightarrow \infty} x_{n+1} = \alpha$$

となり, α は不動点である. また, もし他の不動点 $\beta \neq \alpha$ があったとすると,
 次の不等式より矛盾する.

$$|\alpha - \beta| = |F(\alpha) - F(\beta)| \leq L|\alpha - \beta| < |\alpha - \beta|.$$

ゆえに, 不動点はただ一つしかない. □

3.3 ニュートン法の収束

縮小写像の原理を適用して, ニュートン法 (3.1)_{p.64} による数列の極限が
 $f(x) = 0$ の解 α に収束することを示そう. 解 α を含む適当な区間 J において,
 f は 2 階連続微分可能で, $f'(x) \neq 0$ とする.

$$F(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

とおくと, ニュートン法 (3.1) は $x_{n+1} = F(x_n)$ と表され, 解 α は $\alpha = F(\alpha)$
 を満たすから F の不動点である. また,

$$F'(x) = \frac{f(x)f''(x)}{f'(x)^2}$$

より, $F'(\alpha) = 0$ が成り立つ. よって, $\alpha \in I \subset J$ なる十分小さな閉区間 I をとれば, 任意の $x \in I$ に対して $|F'(x)| \leq L$ ($0 \leq L < 1$) が成り立つ. したがって, F は I 上の縮小写像となり, 縮小写像の原理から, ニュートン法による数列は解 α に収束する.

一般に, 数列 $\{x_n\}$ が, ある番号以上のすべての n について,

$$|x_{n+1} - \alpha| \leq C|x_n - \alpha|^p \quad (C > 0, p > 1) \quad (3.4)$$

を満たすとき, 数列 $\{x_n\}$ は p 次収束するという. (収束性の一般論については 3.6 節 (p.83) を参照.)

ニュートン法による数列は 2 次収束であることを示そう. まず, $f(\alpha) = 0$ とテイラーの定理から, ある ξ が α と x_n の間にあって,

$$0 = f(\alpha) = f(x_n + \alpha - x_n) = f(x_n) + f'(x_n)(\alpha - x_n) + \frac{f''(\xi)}{2}(\alpha - x_n)^2$$

が成り立つ. 仮定から閉区間 I において $\left| \frac{f''(y)}{2f'(x)} \right| \leq C$ を満たす $C > 0$ が存在する ($x, y \in I$) ので,

$$|x_{n+1} - \alpha| = \left| x_n - \alpha - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \right| = \left| \frac{f(x_n) + f'(x_n)(\alpha - x_n)}{f'(x_n)} \right| \leq C|x_n - \alpha|^2$$

が成り立つ. よって, ニュートン法による数列は 2 次収束である.

したがって, ニュートン法がうまく機能している場合は, 正しい桁数が 1 回の反復でおおよそ倍になる. だから, よい初期値 x_0 であれば数回で《終了条件》の① (p.65) によって終了する. 一方, x_0 の選び方が悪く, 《終了条件》の②や③の条件に引っかかって終了したときは, $|f(x_{n+1})|$ が 0 からほど遠いこともある. 解 α がわからない以上, α を含む区間をあらかじめ定めることはできないから仕方がないが, よい初期値 x_0 を決める工夫は考えられる. 例えば, 関数 f の情報を使って解 α に近い初期値を推測したり, 後述する 2 分法 (3.5 節) を用いたりすることができる. また, 「減速」という手法 [46, p.62] や, 次のダビデンコの方法などが知られている.

ダビデンコの方法

関数 $f(x) = \tanh x + 0.9$ の零点をニュートン法 (3.1)_{p.64} で求めてみる. 初

期値を $x_0 = 2$ とすると、図 3.4 のように、

$$x_1 = -24.3836\cdots, \quad x_2 = 3.7785\cdots \times 10^{19}, \quad x_3 = -\text{inf}, \quad x_4 = \text{nan}$$

となって、すぐに破綻する。ここで、**nan** は非数 (NaN, not-a-number)、**-inf** は負の無限大 (infinity) である (0.4節_(p.8))。

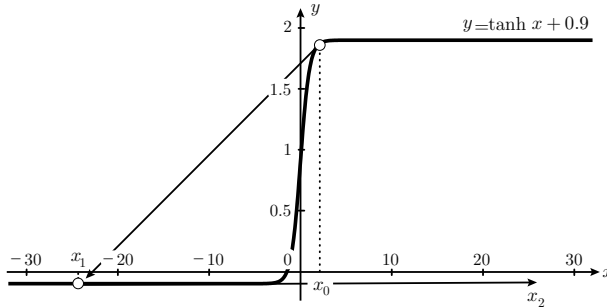


図 3.4 ニュートン法がすぐに破綻する例 (縦横の縮尺は異なる)

次のように初期値 x_0 を探してみよう。与えられた関数 $f(x)$ に対して、方程式

$$f(y(t)) = (1-t)f(y_0), \quad 0 \leq t \leq 1, \quad y(0) = y_0 \quad (3.5)$$

を満たす解 $y(t)$ を考える。 $t = 1$ のとき $f(y(1)) = 0$ であるから、 $y(1)$ が所望の $f(x) = 0$ の解である。 $y(1)$ を求めるために、方程式 (3.5) の両辺を t で微分して得られる微分方程式

$$y'(t) = -\frac{f(y_0)}{f'(y(t))}, \quad 0 \leq t \leq 1, \quad y(0) = y_0 \quad (3.6)$$

を $t = 1$ まで解く。微分方程式 (3.6) は通常、解析的に解けないので数値的に解く。例えば、 $[0, 1]$ を M 等分して $h = 1/M$ とし、時刻 $t_m = mh$ における $y(t_m)$ の近似解を y_m とする ($m = 0, 1, \dots, M$)。数値解法としてオイラー法を用いれば、

$$y_{m+1} = y_m - \frac{f(y_0)}{f'(y_m)} h \quad (m = 0, 1, \dots, M-1) \quad (3.7)$$

より, 近似解 $y_M \approx y(1)$ を得る. そして, ニュートン法の初期値を $x_0 = y_M$ とする. これをダビデンコの方法という [132, p.96].

普通のニュートン法ではすぐに破綻した冒頭の関数 $f(x) = \tanh x + 0.9$ に対してダビデンコの方法を適用してみよう. $M = 100$, $y_0 = 2$ としてオイラー法 (3.7) を用いると,

$$y_M = -1.530976799530267, \quad f(y_M) = -0.010591602157153$$

となる. これより, $x_0 = y_M$ としてニュートン法を適用すると表 3.1 を得る.

表 3.1 ダビデンコの方法を利用 (小数点以下 15 桁を表示)

n	x_n	$f(x_n)$
1	-1.468973402772434	0.000618561435145
2	-1.472210028981184	0.000001797529692
3	-1.472219489502668	0.000000000015305
4	-1.472219489583220	0.000000000000000

簡易ニュートン法と割線法

(3.2)_{p.64} と図 3.1 (p.64) を眺めると, x_n から x_{n+1} を得る操作において, 傾き $f'(x_n)$ の接線の x 切片 x_{n+1} を求めるところを, ある傾き λ の直線の x 切片 x_{n+1} を求めるように変更してもよさそうである. すなわち, $f'(x_n)$ の代わりに λ とした反復法

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{\lambda} \quad \Leftrightarrow \quad \frac{f(x_{n+1}) - f(x_n)}{x_{n+1} - x_n} = \lambda, \quad f(x_{n+1}) = 0$$

を考える ($n = 0, 1, 2, \dots$). しかし, λ の決め方の情報がないと全く意味のない反復になる恐れがある. そこで, 直観的に図 3.1 のような状況であれば (すなわち, x_0 が $f(x) = 0$ の解 α に近ければ), 最初の接線に平行な直線を使い続けてもよさそうであるとみなして, 素朴に $\lambda = f'(x_0)$ とおく. すなわち,

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_0)} \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (3.8)$$

とする。これはニュートン法 (3.1)_{p.64} を簡単にしたものとみなせるので、しばしば簡易ニュートン法と呼ばれる [55, 101].

ニュートン法 (3.1)_{p.64} や簡易ニュートン法 (3.8) において、導関数 f' を求めること自体が困難、あるいは事実上不可能な場合がある。このときは、 λ として平均変化率 (差分商) $\frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}$ を用いればよい。この方法を割線法 (セカント法) という。

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} f(x_n) \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (3.9)$$

ただし、二つの初期値 x_0, x_1 が必要となる。

[問 3.3] 割線法 (3.9) による x_{n+1} を特徴付けよ。

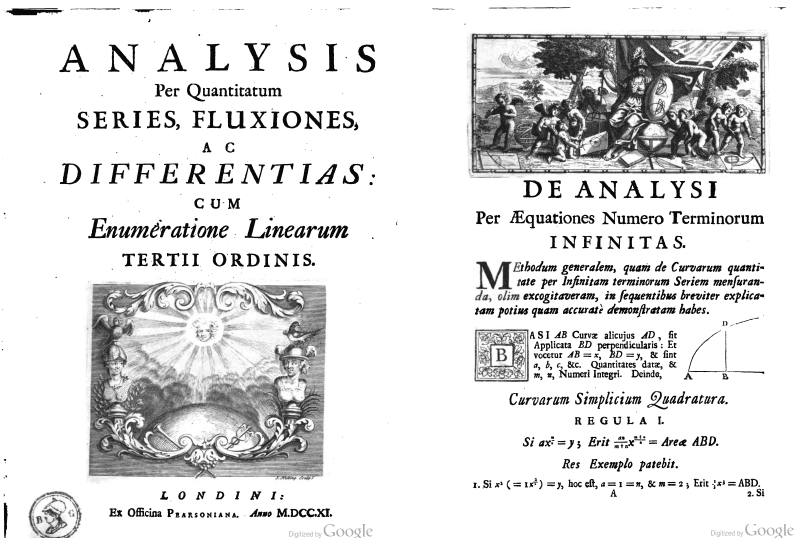
ニュートン法は 2 次収束であったが、割線法は $\frac{1+\sqrt{5}}{2}$ 次収束することが知られている (例えば [73, pp.85–86]. 黄金比が収束次数となるとところが不思議で面白い)。したがって、理論上では収束は遅いが、ニュートン法は導関数の計算の手間があるので、実際に必ず収束が遅くなるとは言いきれない。

さて、オイラー法がオイラーによる方法に起源をもつように、ニュートン法もニュートンによる方法に起源をもつ。それはある 3 次方程式の近似解を求める方法である。次節で少し解説しよう。

3.4 ニュートンによるニュートン法

ニュートン法は、1669 年 (?) のニュートンの論文 [85] に所収の変数 y についての 3 次方程式 $y^3 - 2y - 5 = 0$ に適用された方法に起源をもつ。論文 [85] は、W. Jones によるニュートンの数学論文選集 [51, pp.1–21] に、また、英訳は、D. T. Whiteside 編纂の大著 [128, pp.206–247] におさめられている。図 3.5 に画像元の表紙を引用する。

論文の発行年 1669 は「?」付きであるが、その理由については [128, p.206, 脚注 (1)] を参照されたい。また、論文が選集 [51] におさめられている事情についても [128, pp.206–207, 脚注 (2)] を参照されたい。



(a) 選集 [51] の表紙

(b) 論文 [85] の扉

図 3.5 ニュートンによるニュートン法の起源がみられる論文. デジタルファイルを Google ブックスから入手した.

$y^3 - 2y - 5 = 0$		$+ 2,10000000$ $- 0,00544853$ $+ 2,09455147 = y$
$2 + p = y$	$+ y^3$ $+ 2y$ $- 5$ Summa	$+ 8 + 12p + 6p^2 + p^3$ $- 4 - 2p$ $- 5$ $- 1 + 10p + 6p^2 + p^3$
$0,1 + q = p$	$+ p^3$ $+ 6p^2$ $+ 10p$ $- 1$ Summa	$+ 0,001 + 0,03q + 0,3q^2 + q^3$ $+ 0,06 + 1,2 + 6,0$ $+ 1, + 10,$ $- 1,$ $+ 0,061 + 11,23q + 6,3q^2 + q^3$
$-0,0054 + r = q$	$+ 6,3q^2$ $+ 11,23q$ $+ 0,061$ Summa	$+ 0,000183708 - 0,06804r + 6,3r^2$ $- 0,060642 + 11,23$ $+ 0,061$ $+ 0,000541708 + 11,16196r + 6,3r^2$
$-0,00004854 + s = r$		

図 3.6 論文 [85, p.9] より引用

ニュートンは上述した3次方程式の近似解を求める方法を提示したセクション名を“*Numeralis aequationum affectarum resolutio* (複雑な方程式の数値解法)”としている。その方法は、図 3.6 のような計算法であった。

まず、初期値として $y = 2$ をとる。これはおそらく、 $f(y) = y^3 - 2y - 5$ としたとき、 $f(1) = -6$ 、 $f(2) = -1$ 、 $f(3) = 16$ ということから大雑把な整数値として $y = 2$ を採用したのだと想像される。

次に、 $y = 2 + p$ とおき方程式 $f(y) = 0$ に代入すると

$$p^3 + 6p^2 + 10p - 1 = 0 \quad (3.10)$$

となる。 $p^3 + 6p^2$ を小さいとして無視すると $10p - 1 = 0$ より $p = 0.1$ を得る。次に $p = 0.1 + q$ を (3.10) に代入して

$$q^3 + 6.3q^2 + 11.23q + 0.061 = 0 \quad (3.11)$$

となる。 $q^3 + 6.3q^2$ を無視して近似値 $q \approx -0.0054$ を得る。そして $q = -0.0054 + r$ を、(3.11) から q^3 を無視した

$$6.3q^2 + 11.23q + 0.061 = 0$$

に代入し、 $6.3r^2$ を無視して $r = -0.00004853$ を得る。

以上より

$$y = 2 + 0.1 - 0.0054 - 0.00004853 = 2.09455147$$

という近似値を得る。この値を $f(y)$ に代入すると、

$$y^3 - 2y - 5 = -1.288 \dots \times 10^{-7}$$

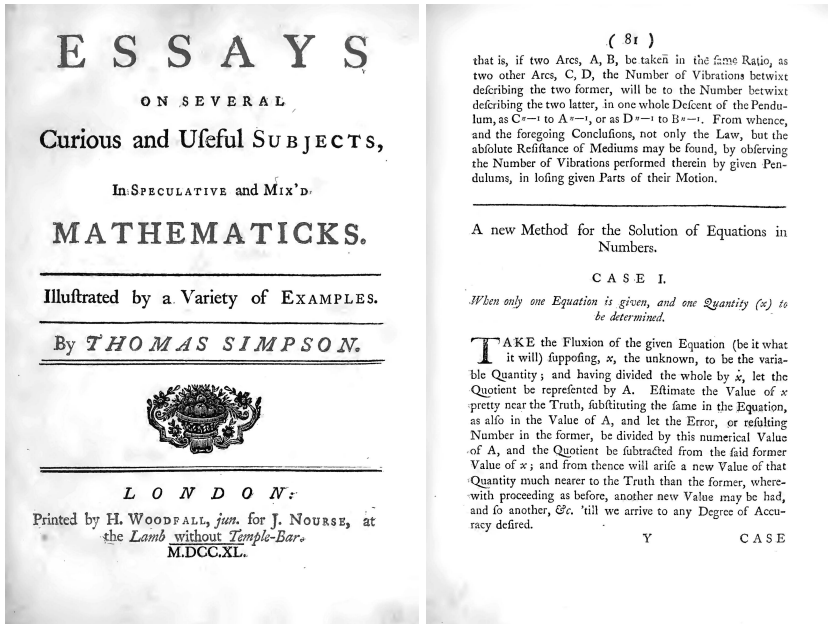
となるので、かなりの高精度といえる。

ニュートンによる元祖ニュートン法は、現代のニュートン法 (3.1) とは見かけ上異なるが、本質は同じである。実際、 $y_0 = 2$ とおいて、 $y_1 = y_0 + p$ とし、テイラー展開

$$f(y_1) = f(y_0) + f'(y_0)p + o(p) = 0$$

から、微小量 $o(p)$ を無視して $p \approx -\frac{f(y_0)}{f'(y_0)} = 0.1$ を得ている。これは、ニュートン法 (3.1)_{p.64} の Step 1 と全く同じである。Step 2 も同様の考えで、 $y_2 = y_1 + q$ とおいて、そこから $q \approx -\frac{f(y_1)}{f'(y_1)} \approx -0.0054$ を得ている。ここまで完成しているのだから、やはりニュートン法はニュートンの名前を冠するに値するであろう。一方、ニュートンの方法だと p, q, r の方程式を毎回計算し直す必要がある。同じ作業を反復してはいるが逐次代入になっていないという意味で、現在のニュートン法とは異なるという意見もある。後年 (1690 年)、ラフソンが一般の 3 次方程式に拡張したため、ニュートン法は、しばしばニュートン-ラフソン (Newton-Raphson) 法とも呼ばれる ([131, p.13, 注 1]) が、多項式の域を超えなかったので事情は変わらなかった。実は、第 2 章の数値積分において登場したシンプソンによって現代的なニュートン法 (3.1)_{p.64} に到達したとみるのが通説のようである。図 3.7 にシンプソンの 1740 年の論文 [111] の表紙とニュートン法について言及した章の扉を紹介しよう。ところで、参考文献 [111] のタイトルに *Mathematicks* とあるが、これはスペルミスではない。図 3.7 (a) をみよ。

なぜニュートン-ラフソン-シンプソン法と呼ばれないのか。一説によると、ニュートン 1669 年、ラフソン 1690 年、シンプソン 1740 年という年の順において、ラフソンからシンプソンまでの間が長すぎるが、この間にニュートンはウォリスに手紙を書いていて、そこで導関数について言及していたらしい。しかし、その手紙は紛失。最終的に、フーリエが著書 [25] の中で、 $f(x) = 0$ の解を見つける方法として何度も “la méthode newtonienne” などと呼んでいることが、呼び名の定着に一役買ったらしい (確かに、デジタルファイル [25] を Google ブックスから入手して newtonienne と検索すると、多くのページで見つかる。) シンプソンは数値積分において「シンプソンの公式」に名が残っている。1743 年の著書 [112] 以降に公式に名前が使われ始めたが、シンプソン自身は、ニュートンに何かを教わったと自身で謝辞を述べている [88]。また、シンプソン以前から公式は知られていて、遅くとも 1639 年にはカヴァリエリが発



(a) Simpson [111] の表紙

(b) Case I (p.81)

図 3.7 シンプソンによるニュートン法の起源がみられる本. デジタルファイルは Google ブックスから入手した.

見しており, グレゴリーも 1668 年の著書に明記したようだ [127]. ニュートン法にシンプソンの名がないのは不公平に思えるが, シンプソンの公式に名を残していることを考えると, 結果的にはおあいこといえる. とまれ, ニュートンは現代のニュートン法に到達していたのか. 到達していてもしていなくても実に面白い話である. 詳しくは, [43, 2.6.1 項], [16, 1.1 節 (Historical Note)] や [17, 139, 63, 93, 90], あるいは [92, 5.4 節] などを参照されたい. 不動点, 縮小写像, ニュートン法についての技術的な詳細や拡張については, 例えば [131], [132, 第 5 章], [68, 第 1 章] などを参照するとよいだろう.

最後に, 実際にシンプソンによるニュートン法を図 3.8 から解読することを問として本節を締めくくろう. 図 3.8 はシンプソンがニュートン法の適用例として挙げた五つの例のうち, 最初の例, Example I である.

EXAMPLE I.

LET $300x - x^3 - 1000$ be given $= 0$; to find a Value of x . From $300x - 3x^2\dot{x}$, the Fluxion of the given Equation, having expunged $\dot{x}$, (*Cafe* I.) there will be $300 - 3xx = A$: And, because it appears by Inspection, that the Quantity $300x - x^3$, when x is $= 3$, will be less, and when $x = 4$, greater than 1000, I estimate x at 3.5, and substitute instead thereof, both in the Equation and in the Value of A , finding the Error in the former $= 7.125$, and the Value of the latter $= 263.25$: Wherefore, by taking $\frac{7.125}{263.25} = .027$ from 3.5 there will remain 3.473 for a new Value of x ; with which proceeding as before, the next Error, and the next Value of A , will come out .00962518, and 263.815 respectively; and from thence the third Value of $x = 3.47296351$; which is true, at least, to 7 or 8 Places.

図 3.8 論文 [111, p.83] から引用. 後半の数値で .00962518 と $x = 3.47296351$ は, .00961518 と $x = 3.47296355$ の間違いであろう (ゝの数字に注目).

[問 3.4] 図 3.8 の Example I において, シンプソンは関数 $f(x) = 300x - x^3 - 1000$ が “ $= 0$ ” となる x を見つける方法を紹介している ($f(x)$ とは書いていない). Fluxion (流率) はニュートンが導入した時間についての導関数 $\dot{x}$ である. $f(x)$ を時間微分すると $f'(x)\dot{x} = 300\dot{x} - 3x^2\dot{x}$ となるが ($f'(x)\dot{x}$ とは書いていない), ここから $\dot{x}$ を消去し, $A = 300 - 3x^2$ とおいている. これは $f'(x)$ に他ならない. (A は approximation (近似) の頭文字か.) そして, $x = 3$ のとき $300x - x^3$ は 1000 より小さく (つまり $f(x) < 0$), $x = 4$ のとき $300x - x^3$ は 1000 より大きい (つまり $f(x) > 0$) から, $x = 3.5$ と評価するとしている.

その後, どのように計算を進めて最終的な数 $x = 3.47296351$ に到達したのだろうか. ニュートン法 (3.1)_{p.64} を念頭に $x = 3.5$ の評価以降の続きを書け.

表 3.2 シンプソンの Example I の倍精度計算 (小数点以下 15 桁を表示)

n	x_n	$f(x_n)$
0	3.5	7.125
1	3.47293447293447	-0.007671872275296
2	3.47296355330521	-0.000000008810844

gnuplot (倍精度) でシンプソンの Example I と同様に計算してみると表 3.2 を得る. $f(x_2) = -8.81 \cdots \times 10^{-9}$ であるので, シンプソンの値よりももちろんよい. $n = 3$ 以降は微小振動して $f(x_n) = (-1)^n 1.13686837721616 \times 10^{-13}$ を繰り返すが, 値はずっと $x_n = 3.47296355333861$ であるので, x_2 において太字の部分までは正しい値と思われる.

ニュートン法は $f(x) = 0$ の解を求める強力な方法であったが, 理想的に収束させるには初期値の工夫が必要であった. 例えば, $f(3) < 0$, $f(4) > 0$ だから, シンプソンの Example I における最初の x の値を, 3 と 4 の真ん中の値にして 3.5 とした. 次節では, この考えをそのまま反復させた方法を紹介する. 原始的だがこちらも捨てがたい.

3.5 2分法

関数 f は連続であるとし, $f(x) = 0$ の解を α とする. (簡単のため単根とする.) $a < b$ で $f(a)f(b) < 0$ とすると, 中間値の定理から $\alpha \in (a, b)$ がわかる.

$x = \frac{a+b}{2}$ とすると,

$$(1) f(a)f(x) < 0, \quad (2) f(a)f(x) > 0, \quad (3) f(a)f(x) = 0$$

のいずれかが成り立つ. このとき, (単根という仮定から,)

- (1) $\alpha \in (a, x)$ であることが中間値の定理からわかる.
- (2) $\alpha \in (x, b)$ であることが中間値の定理からわかる.
- (3) $f(a) \neq 0$ から $f(x) = 0$ となり, $x = \alpha$ である.