数値解析（松尾）　配付資料　　2019 年 11 月 18 日

■ 非線形方程式の解法

与えられた関数 $\boldsymbol{f}:\mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ に対して，方程式 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$ を満たす $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$ を求める問題を考える．一般に有限回手順では解けない．

更新式：

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} := \boldsymbol{x}^{(k)} + \Delta\boldsymbol{x}^{(k)} \qquad (k = 0, 1, \ldots)$$

により解を反復的に更新し，何らかの停止則，たとえば

$$\|\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(k+1)})\| \le \varepsilon_{\mathrm{tol}}$$

により反復を停止する（$\varepsilon_{\mathrm{tol}}$ は丸め誤差限界を考慮して定める「許容誤差」）．ここで $\|\cdot\|$ は $\mathbb{R}^d$ の何らかのノルム（例えば最大ノルムやユークリッドノルム）．更新量 $\Delta\boldsymbol{x}^{(k)}$ には様々な定め方がある．

■ 縮小写像の原理

定理．$D \subseteq \mathbb{R}^d$ を閉集合とする．また $\boldsymbol{g}: D \to D$ を縮小写像，すなわち，ある L $(0 < L < 1)$ が存在して，任意の $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in D$ に対して

$$\|\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y})\| \le L\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|$$

を満たす写像とする．このとき $\boldsymbol{g}$ の不動点（$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^\star) = \boldsymbol{x}^\star$ を満たす $\boldsymbol{x}^\star$）が D の中にただ一つ存在し，任意の $\boldsymbol{x} \in D$ に対して

$$\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{g}^k(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^\star.$$

ただし $\boldsymbol{g}^k$ は写像 $\boldsymbol{g}$ を k 回合成した写像を表す．

■ Newton 法

$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$ を解くための Newton 法

$\boldsymbol{x}^{(0)}$: given
for $k = 0, 1, 2, \ldots$ {
　$\boldsymbol{x}^{(k+1)} := \boldsymbol{x}^{(k)} - J(\boldsymbol{x}^{(k)})^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(k)})$
}

ただし $J(\boldsymbol{x}) = (\partial f_i/\partial x_j)$ は $\boldsymbol{f}$ の Jacobi 行列．

定理（Newton 法の 2 次収束性）　$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$ が真の解 $\boldsymbol{x}^*$ の近傍 D で C^2 級で，$J(\boldsymbol{x}^*)$ が正則ならば，$\boldsymbol{x}^*$ から十分近い初期値から出発する Newton 法の近似解は $\boldsymbol{x}^*$ に 2 次収束する：

$$\exists C > 0, \quad \|\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^*\| \le C\|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^*\|^2 \quad (k = 0, 1, 2, \ldots).$$

（注）$J(\boldsymbol{x}^*)$ が正則でない場合の振る舞いは一般に複雑．ただし 1 次元のときは「重根ならば 1 次収束」が成り立つ．

（注）最適化における「Newton 法」（$\min g(\boldsymbol{x})$ を求めるための Newton 法）と混同しないこと．

【演習】（自分の興味に従って自習し，理解・実装力を高めることを奨励する）

1. 適当な $f(x)=0$ に対して Newton 法を試してみよ．特に，連立非線形方程式の場合に Jacobian を書き下して実装する練習をしてみよ.（当然ながら連立一次方程式を解く練習にもなる.）
2. 適当な不動点反復法 $f(x)=0 \iff x=g(x)$ に対し数値的に収束を観察し，収束する場合には縮小写像の原理で説明できるか考察してみよ．