非線形方程式の解法（ミシガン大学講義 Mean502，担当：菊池昇）

一般に，未知数がn，方程式数がnの非線形方程式は次式のように書ける。

$$\begin{aligned} &f_1(u_1,u_2,\cdots,u_n)=0 \\ &f_2(u_1,u_2,\cdots,u_n)=0 \\ &\quad\vdots \\ &f_n(u_1,u_2,\cdots,u_n)=0 \end{aligned} \tag{1}$$

上式をベクトル・マトリックス表現で表すと，

$$\mathbf{f}(\mathbf{u})=\mathbf{0} \quad \in R^n \qquad \mathbf{u}\in R^n \tag{2}$$

となる。ここに，R^nはn成分の実数ベクトルを表す。

ここで，$n\times n$の正値対称行列

$$\mathbf{S} \quad \in R^{n\times n} \qquad \mathbf{S}=\mathbf{S}^T \tag{3}$$

を導入する。この場合$\mathbf{S}$の最小固有値$\lambda_{\min}$は正値となる。すなわち，

$$\mathbf{S}\mathbf{u}=\lambda_{\min}\mathbf{u} \qquad \lambda_{\min}>0 \tag{4}$$

この場合，$\mathbf{S}$は特異でないマトリックスとなる。換言すれば，任意の$\mathbf{S}^{-1}$に対して，

$$\begin{aligned} &\mathbf{S}^{-1}\mathbf{u}=\mathbf{0} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{u}=\mathbf{0} \\ &\mathbf{S}\mathbf{u}=\mathbf{0} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{u}=\mathbf{0} \end{aligned} \tag{5}$$

が成り立つ。このとき，

$$\mathbf{f}(\mathbf{u})=\mathbf{0} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{S}^{-1}\mathbf{f}(\mathbf{u})=\mathbf{0} \tag{6}$$

と書ける。(6)式はさらに次式のように書ける。

$$\mathbf{u}-\mathbf{u}+\alpha\mathbf{S}^{-1}\mathbf{f}(\mathbf{u})=\mathbf{0} \tag{7}$$

したがって，$\mathbf{f}(\mathbf{u})=\mathbf{0}$は，次式の問題と解くことと等価である。

$$\mathbf{u}=\mathbf{u}-\alpha\mathbf{S}^{-1}\mathbf{f}(\mathbf{u}) \tag{8}$$

上式は，さらに次式のように表される。

$$\mathbf{u}=\mathbf{g}(\mathbf{u}) \tag{9}$$

ここに，

$$\mathbf{g}(\mathbf{u})=\mathbf{u}-\alpha\mathbf{S}^{-1}\mathbf{f}(\mathbf{u}) \tag{10}$$

(9)式は固定点問題（a fixed point problem）となる。

数学の定理に固定点の定理（The Fixed Point Theorem）がある。これは，次式

$$\|\mathbf{g}(\mathbf{u})-\mathbf{g}(\mathbf{v})\|<k\|\mathbf{u}-\mathbf{v}\| \qquad 0<k<1 \tag{11}$$

を満足する定数kが存在するならば，唯一の固定点$\mathbf{u}$が存在するという定理である。すなわち，(11)式が成り立てば，(9)式の解は存在する。

さらに，(9)式の解は次式

$$\mathbf{u}^{n+1}=\mathbf{g}(\mathbf{u}^n) \tag{12}$$

で定義される$\mathbf{u}^n$の$n \to \infty$の極限値として表される。また，このとき次式が成り立つ。

$$\left\|\mathbf{u}^n - \mathbf{u}\right\| \le \frac{k^n}{1-k}\left\|\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_0\right\| \tag{13}$$

ここに，$\mathbf{u}^0$は初期値を表す。

(13)式は次のようにして証明できる。

$$\begin{aligned}\left\|\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n\right\| &= \left\|\mathbf{g}\left(\mathbf{u}^n\right) - \mathbf{g}\left(\mathbf{u}^{n-1}\right)\right\| \\ &\le k\left\|\mathbf{u}^n - \mathbf{u}^{n-1}\right\| \\ &= \left\|\mathbf{g}\left(\mathbf{u}^{n-1}\right) - \mathbf{g}\left(\mathbf{u}^{n-2}\right)\right\| \\ &\le k^2\left\|\mathbf{u}^{n-1} - \mathbf{u}^{n-2}\right\| \\ &= \left\|\mathbf{g}\left(\mathbf{u}^{n-2}\right) - \mathbf{g}\left(\mathbf{u}^{n-3}\right)\right\| \\ &\vdots \\ &\le k^n\left\|\mathbf{u}^1 - \mathbf{u}^0\right\|\end{aligned} \tag{14}$$

ここで，pを$p > n$とすると，

$$\left\|\mathbf{u}^{p+1} - \mathbf{u}^n\right\| = \left\|\mathbf{u}^{p+1} - \mathbf{u}^p + \mathbf{u}^p - \mathbf{u}^{p-1} + \mathbf{u}^{p-1} + \cdots + \mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n\right\| \tag{15}$$

ここで，$\|a+b\| \le \|a\| + \|b\|$であるから，

$$\begin{aligned}\left\|\mathbf{u}^{p+1} - \mathbf{u}^n\right\| &= \left\|\mathbf{u}^{p+1} - \mathbf{u}^p\right\| + \left\|\mathbf{u}^p - \mathbf{u}^{p-1}\right\| + \cdots + \left\|\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n\right\| \\ &\le \left(k^{p-n} + k^{p-n-1} + \cdots + k + 1\right)k^n\left\|\mathbf{u}^1 - \mathbf{u}^0\right\| \\ &= \left(\sum_{m=0}^{p-n} k^m\right)k^n\left\|\mathbf{u}^1 - \mathbf{u}^0\right\|\end{aligned} \tag{16}$$

ここで，$p \to +\infty$とすると，

$$\sum_{m=0}^{\infty} k^m = \frac{1}{1-k} \qquad (k < 1) \tag{17}$$

が成り立つから，結局，

$$\left\|\mathbf{u}^\infty - \mathbf{u}^n\right\| \le \frac{k^n}{1-k}\left\|\mathbf{u}^1 - \mathbf{u}^0\right\| \tag{18}$$

となる。いま$\mathbf{u}^\infty = \mathbf{u}$であるから(13)式が成り立つ。

以上から，(2)式の$\mathbf{f}\left(\mathbf{u}\right) = \mathbf{0}$の問題は，次式の反復法の形式で表される。

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n - \alpha\mathbf{S}^{-1}\mathbf{f}\left(\mathbf{u}^n\right) \tag{19}$$

上式は，反復法の最も一般的な形式である。

(19)式において，

$$\begin{cases} \mathbf{S} = \nabla \mathbf{f}\left(\mathbf{u}^{n-1}\right) = \left[\dfrac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}}\right]\left(\mathbf{u}^{n-1}\right) \\ \alpha = 1 \end{cases} \tag{20}$$

と置けば，(19)式は Newton 法となる。また，

$$\begin{cases} \mathbf{S} = \nabla \mathbf{f}\left(\mathbf{u}^{0}\right) = \left[\dfrac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}}\right]\left(\mathbf{u}^{0}\right) \\ \alpha = 1 \end{cases} \tag{21}$$

と置けば，修正 Newton 法となる。また，以下のような置き方もある。

$$\begin{cases} \mathbf{S} = \dfrac{\mathbf{f}\left(\mathbf{u}_n\right) - \mathbf{f}\left(\mathbf{u}_0\right)}{\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_0} \left(= \left[\dfrac{f_i\left(\mathbf{u}_n\right) - f_i\left(\mathbf{u}_0\right)}{\left(u_j\right)_n - \left(u_j\right)_0} \right] \right) \\ \alpha = 1 \end{cases} \tag{22}$$

$$\begin{cases} \mathbf{S} = \dfrac{\mathbf{f}\left(\mathbf{u}_n\right) - \mathbf{f}\left(\mathbf{u}_{n-1}\right)}{\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_{n-1}} \approx \nabla \mathbf{f}\left(\mathbf{u}_n\right) \\ \alpha = 1 \end{cases} \tag{23}$$

(2)式の特別な場合として，次式の線形方程式が考えられる。

$$\mathbf{Au} - \mathbf{b} = \mathbf{0} \tag{24}$$

もう一つの特別な場合として，次式

$$\nabla J\left(\mathbf{u}\right) = \mathbf{f}\left(\mathbf{u}\right) \tag{25}$$

を満足するポテンシャル J が存在すると，(2)式は次の最小化問題として定式化できる。

$$\min_{\mathbf{u}} J\left(\mathbf{u}\right) \tag{26}$$

ただし，(25)式の ∇ は $\mathbf{u}$ に関する gradient を表す。

(24)式において， $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}$ とすると，次式のポテンシャルを定義できる。

$$J\left(\mathbf{u}\right) = \frac{1}{2}\mathbf{u}^T\mathbf{Au} - \mathbf{u}^T\mathbf{b} \tag{27}$$

上式は，次式を意味する。

$$\nabla J\left(\mathbf{u}\right) = \mathbf{Au} - \mathbf{b} \tag{28}$$

もし，$\mathbf{A}^T \neq \mathbf{A}$ の場合, または $\mathbf{f}\left(\mathbf{u}\right)$ がポテンシャル J の gradient として求められない場合は,

次式を定義することができる。

$$J\left(\mathbf{u}\right) = \frac{1}{2}\mathbf{f}\left(\mathbf{u}\right)^T \mathbf{f}\left(\mathbf{u}\right) \tag{29}$$

線形の場合は,

$$J(\mathbf{u}) = \frac{1}{2}(\mathbf{Au}-\mathbf{b})^T(\mathbf{Au}-\mathbf{b}) \tag{30}$$

となる。

ここで，(19)式のαを(26)式を満足するように定めるものとする。この場合，

$$\min_{\alpha} J(\mathbf{u}_{n+1}) = \min_{\alpha}\left[\frac{1}{2}\mathbf{f}(\mathbf{u}_{n+1})^T\mathbf{f}(\mathbf{u}_{n+1})\right] \tag{31}$$

または，$\mathbf{A}^T = \mathbf{A}$が成り立つ場合は，

$$\min_{\alpha} J(\mathbf{u}_{n+1}) = \min_{\alpha}\left[\frac{1}{2}\mathbf{u}_{n+1}{}^T\mathbf{Au}_{n+1} - \mathbf{u}_{n+1}\mathbf{b}\right] \tag{32}$$

となる。ここに，

$$J(\mathbf{u}_{n+1}) = J\left(\mathbf{u}_n - \alpha\mathbf{S}^{-1}\mathbf{f}(\mathbf{u}^n)\right) = J\left(\mathbf{u}_n - \alpha\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{Au}_n - \mathbf{b})\right) \tag{33}$$

ここで，残差$\mathbf{r}_n$を，

$$\mathbf{r}_n = \mathbf{Au}_n - \mathbf{b} \tag{34}$$

で定義すると，

$$J(\mathbf{u}_{n+1}) = \frac{1}{2}\left(\mathbf{u}_n - \alpha\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right)^T\mathbf{A}\left(\mathbf{u}_n - \alpha\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right) - \left(\mathbf{u}_n - \alpha\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right)^T\mathbf{b} \tag{35}$$

(32)式が成り立つには，

$$\begin{aligned}\frac{\partial J(\mathbf{u}_{n+1})}{\partial\alpha} &= \left(-\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right)^T\mathbf{A}\left(\mathbf{u}_n - \alpha\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right) - \left(-\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right)^T\mathbf{b} \\ &= -\left(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right)^T\left(\mathbf{Au}_n - \mathbf{b} - \alpha\mathbf{AS}^{-1}\mathbf{r}_n\right) \\ &= -\left(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right)^T\left(\mathbf{r}_n - \alpha\mathbf{AS}^{-1}\mathbf{r}_n\right) = 0\end{aligned} \tag{36}$$

(36)式より，

$$\alpha = \frac{\left(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right)^T\mathbf{r}_n}{\left(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right)^T\mathbf{A}\left(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right)} \tag{37}$$

これは，最急降下法と呼ばれる方法である。

(8)式は，さらに２つのパラメータを用いて次のようにも拡張できる。

$$\mathbf{u} = \mathbf{u} + \beta(\mathbf{u} - \mathbf{u}) - \alpha\mathbf{S}^{-1}\mathbf{f}(\mathbf{u}) \tag{38}$$

上式から，次式の反復解法が考えられる。

$$\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + \beta(\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_{n-1}) - \alpha\mathbf{S}^{-1}\mathbf{f}(\mathbf{u}_n) \tag{39}$$

線形問題の場合（$\mathbf{Au} = \mathbf{b}\quad\left(\mathbf{A}^T = \mathbf{A}\right)$）の場合は，

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_{n+1} &= \mathbf{u}_n + \beta(\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_{n-1}) - \alpha\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{Au}_n - \mathbf{b}) \\ &= \mathbf{u}_n + \beta\mathbf{d}_n - \alpha\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\end{aligned} \tag{40}$$

ここに，$\mathbf{d}_n = \mathbf{u}_n - \mathbf{u}_{n-1}$， $\mathbf{r}_n = \mathbf{A}\mathbf{u}_n - \mathbf{b}$ である。(40)式は，さらに次のようにも書ける。

$$\mathbf{d}_{n+1} = \beta\mathbf{d}_n - \alpha\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n \tag{41}$$

このとき，2つの係数α, β は，次式の2次元の最小化問題を解くことによって求められる。

$$\min_{\alpha,\beta} J(\mathbf{u}_{n+1}) = \min_{\alpha,\beta}\left[\frac{1}{2}\mathbf{u}_{n+1}{}^T\mathbf{A}\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_{n+1}\mathbf{b}\right] \tag{42}$$

このように2つのパラメータを用いる方法が前処理付き共役勾配法（Pre-conditions Conjugate Gradient Method）と呼ばれる。前処理付き共役勾配法では，$\mathbf{S}$ として，$\mathbf{A}$ の対角行列，または3重対角行列が用いられる。これは，この場合$\mathbf{S}^{-1}\mathbf{A}$ が単位マトリックスに近くなり収束が速まるためである。

(42)式の $J(\mathbf{u}_{n+1})$ は，(41)式を代入すると次式となる。

$$J(\mathbf{u}_{n+1}) = \frac{1}{2}\left(\mathbf{u}_n + \beta\mathbf{d}_n - \alpha\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right)^T \mathbf{A}\left(\mathbf{u}_n + \beta\mathbf{d}_n - \alpha\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right) - \left(\mathbf{u}_n + \beta\mathbf{d}_n - \alpha\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right)^T \mathbf{b} \tag{43}$$

(42)式を満足する解は，次式から得られる。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial J(\mathbf{u}_{n+1})}{\partial\alpha} &= -\left(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right)^T\left(\mathbf{r}_n + \beta\mathbf{A}\mathbf{d}_n - \alpha\mathbf{A}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right) = 0\\
\frac{\partial J(\mathbf{u}_{n+1})}{\partial\beta} &= \mathbf{d}_n{}^T\left(\mathbf{r}_n + \beta\mathbf{A}\mathbf{d}_n - \alpha\mathbf{A}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right) = 0
\end{aligned} \tag{44}$$

上式より，

$$\begin{bmatrix} \left(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right)^T\mathbf{A}\left(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right) & -\left(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right)^T\mathbf{A}\mathbf{d}_n \\ -\mathbf{d}_n{}^T\mathbf{A}\left(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right) & \mathbf{d}_n{}^T\mathbf{A}\mathbf{d}_n \end{bmatrix}\begin{Bmatrix}\alpha\\ \beta\end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix}\left(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right)^T\mathbf{r}_n \\ -\mathbf{d}_n{}^T\mathbf{r}_n\end{Bmatrix} \tag{45}$$

したがって，α, β は

$$\begin{Bmatrix}\alpha\\ \beta\end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \left(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right)^T\mathbf{A}\left(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right) & -\left(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right)^T\mathbf{A}\mathbf{d}_n \\ -\mathbf{d}_n{}^T\mathbf{A}\left(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right) & \mathbf{d}_n{}^T\mathbf{A}\mathbf{d}_n \end{bmatrix}^{-1}\begin{Bmatrix}\left(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{r}_n\right)^T\mathbf{r}_n \\ -\mathbf{d}_n{}^T\mathbf{r}_n\end{Bmatrix} \tag{46}$$

から計算される。