非線形方程式

2019.

非線形方程式 $f(x)=0$

$f(x)$: 連続な非線形関数.

1. 二分法 (bisection method)

$f(x)=0$ の根 x^* を求める.

<二分法のアルゴリズム>

x^* に近い a_0, b_0 で $f(a_0)<0<f(b_0)$ なるものをとる;

$k=0,1,2,\cdots$ に対し

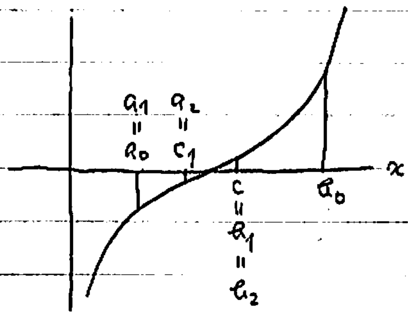
$c_k = \dfrac{a_k+b_k}{2}$;

$f(c_k)=0$ ならば $x^*=c_k$ として反復終了;

$|b_k-a_k|<\varepsilon|b_0-a_0|$ ならば $x^*=c_k$ として反復終了;

$f(a_k)f(c_k)<0$ ならば $a_{k+1}=a_k$, $b_{k+1}=c_k$;

$f(b_k)f(c_k)<0$ ならば $a_{k+1}=c_k$, $b_{k+1}=b_k$;



$|a_k-b_k| \le 2^{-k}|a_0-b_0| \to 0$ より a_k, b_k は $k\to\infty$ である ξ に収束する;

$$\lim_{k\to\infty} a_k = \lim_{k\to\infty} b_k = \xi.$$

このとき, $f(\xi)=0$, i.e., $\xi = x^*$

∵ $f(x)$ は連続関数であるから,

$$f(\xi) = f(\lim_{k\to\infty} a_k) = f(\lim_{k\to\infty} b_k) = \lim_{k\to\infty} f(a_k) = \lim_{k\to\infty} f(b_k).$$

a_k の決め方より $f(a_k)<0$ であるから, $f(\xi)=\lim_{k\to\infty} f(a_k)\le 0$,

b_k の決め方より $f(b_k)>0$ であるから, $f(\xi)=\lim_{k\to\infty} f(b_k)\ge 0$. ∴ $f(\xi)=0$. ☒

2. Newton法

x_0 : $f(x)=0$ の近似解.
よりよい近似解 $x_1 = x_0 + \Delta x$ を求めたい.

$$0 = f(x_1) = f(x_0+\Delta x) \simeq f(x_0) + f'(x_0)\Delta x$$

$$\therefore \quad \Delta x = -\frac{f(x_0)}{f'(x_0)}, \quad x_1 = x_0 + \Delta x \text{ とすればよい.}$$

↓

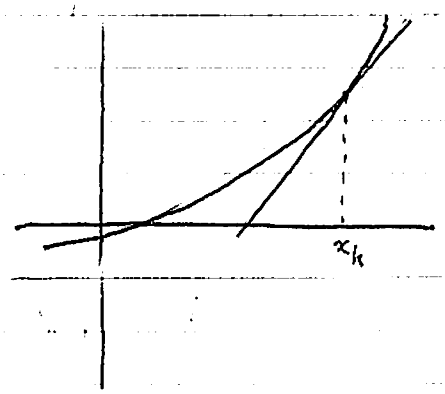
これをくり返し, $f(x)=0$ の逐次近似解 $x_0, x_1, x_2, \cdots$ を定める
… Newton法

＜Newton法のアルゴリズム＞

初期解 x_0 をとる;
$k = 0, 1, 2, \cdots$ に対して,

$$\Delta x = -\frac{f(x_k)}{f'(x_k)};$$

$x_{k+1} = x_k + \Delta x$;
x_{k+1} が真の解 x^* に十分近いと判定したら,
$x^* = x_{k+1}$ として反復終了;



誤差 $\varepsilon_k = x_k - x^*$ の減衰の仕方.

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

の両辺から x^* を引いて,

$$\varepsilon_{k+1} = \varepsilon_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}.$$

$$f(x_k) = f(x^*+\varepsilon_k) = \underbrace{f(x^*)} + f'(x^*)\varepsilon_k + \frac{1}{2}f''(x^*)\varepsilon_k^2 + \frac{1}{6}f'''(x^*)\varepsilon_k^3 + \cdots,$$

$$f'(x_k) = f'(x^*+\varepsilon_k) = f'(x^*) + f''(x^*)\varepsilon_k + \frac{1}{2}f'''(x^*)\varepsilon_k^2 + \frac{1}{6}f^{(4)}(x^*)\varepsilon_k^3 + \cdots.$$

x^* が単根 ($f(x^*)=0$, $f'(x^*)\neq 0$) の場合

$$\varepsilon_{k+1} = \varepsilon_k - \frac{f'(x^*)\varepsilon_k + \frac{1}{2}f''(x^*)\varepsilon_k^2 + \frac{1}{6}f'''(x^*)\varepsilon_k^3 + \cdots}{f'(x^*) + f''(x^*)\varepsilon_k + \frac{1}{2}f'''(x^*)\varepsilon_k^2 + \frac{1}{6}f^{(4)}(x^*)\varepsilon_k^3 + \cdots}$$

$$= \varepsilon_k - \left\{ f'(x^*)\varepsilon_k + \frac{1}{2} f''(x^*)\varepsilon_k^2 + \cdots \right\} \frac{1}{f'(x^*)} \left\{ 1 + \frac{f''(x^*)}{f'(x^*)}\varepsilon_k + \frac{f'''(x^*)}{2f'(x^*)}\varepsilon_k^2 + \cdots \right\}^{-1}$$

$$= \varepsilon_k - \left\{ \varepsilon_k + \frac{1}{2}\frac{f''(x^*)}{f'(x^*)}\varepsilon_k^2 + \cdots \right\}\left\{ 1 - \frac{f''(x^*)}{f'(x^*)}\varepsilon_k + O(\varepsilon_k^2) \right\}$$

$$= \varepsilon_k - \left\{ \varepsilon_k - \frac{1}{2}\frac{f''(x^*)}{f'(x^*)}\varepsilon_k^2 + O(\varepsilon_k^3) \right\}$$

$$= \frac{1}{2}\frac{f''(x^*)}{f'(x^*)}\varepsilon_k^2 + O(\varepsilon_k^3).$$

$\therefore\ \varepsilon_{k+1} = O(\varepsilon_k^2)$ … 二次収束

x^* が二重根 ($f(x^*) = f'(x^*) = 0,\ f''(x^*) \neq 0$) の場合,

$$\varepsilon_{k+1} = \varepsilon_k - \frac{\frac{1}{2}f''(x^*)\varepsilon_k^2 + \frac{1}{6}f'''(x^*)\varepsilon_k^3 + \cdots}{f''(x^*)\varepsilon_k + \frac{1}{2}f'''(x^*)\varepsilon_k^2 + \cdots}$$

$$= \varepsilon_k - \left\{ \frac{1}{2}\varepsilon_k + \frac{1}{6}\frac{f'''(x^*)}{f''(x^*)}\varepsilon_k^2 + \cdots \right\}\left\{ 1 + \frac{1}{2}\frac{f'''(x^*)}{f''(x^*)}\varepsilon_k + \cdots \right\}^{-1}$$

$$= \frac{1}{2}\varepsilon_k + O(\varepsilon_k^2).$$

$\therefore\ \varepsilon_{k+1} = O(\varepsilon_k)$ … 一次収束

x^* が重根の場合, 収束が遅くなる.

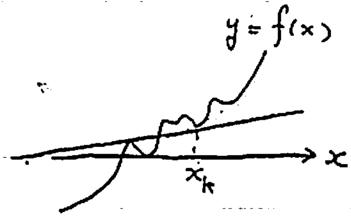
＜収束判定の仕方＞

$$\begin{cases} \varepsilon_1 = |f'(x_k)|\,\Delta x & (\Delta x : \text{許容誤差}) \\ \varepsilon_2 = (\text{許容残差}) \end{cases}$$

として,

$|f(x_k)| < \varepsilon_1$ または $|f(x_k)| < \varepsilon_2$

となったら, 反復を終了して $x^* = x_k$ を返す.



十分収束したと判断したら, さっさと終了する.

そうしないと, x_k がとんでもない値に飛んでしまう.

($\because$ $f(x)$ は零点 x^* 近くでは精度が悪い)

* カオス法 (ら部定) $|f(x_{k+1})| > |f(x_k)|$ となったら反復終了.

〈大域的収束性の改善〉

Newton法：x_k が真の解 x^* に十分近くなったら速く収束する。
x_k が x^* から遠いときは収束が遅い

↓

修正量 Δx_k が大きすぎる。

↓

減速Newton法　（Newton法：「局所的な線形近似」を基礎とする）

$$x_{k+1} = x_k - C\frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \quad (0 < C < 1).$$

修正量 C の自動調整

1) 最初は $C = 1$ とする。
2) $x_{k+1} = x_k - C\dfrac{f(x_k)}{f'(x_k)}$.
3) $|f(x_{k+1})| > |f(x_k)|$ ならば $C := (1/2)C$ として 2) に戻る。

〈多変数関数の場合〉

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

i.e.

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \cdots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \cdots, x_n) = 0 \\ \quad \cdots \\ f_n(x_1, x_2, \cdots, x_n) = 0 \end{cases}$$

k次近似解 $\boldsymbol{x}_k$

$$\boldsymbol{0} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_k + \Delta\boldsymbol{x}_k) \simeq \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_k) + J(\boldsymbol{x}_k)\Delta\boldsymbol{x}_k$$

$$J(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix} \cdots \text{Jacobi行列}$$

$$\therefore \quad \Delta\boldsymbol{x}_k = -J^{-1}(\boldsymbol{x}_k)\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_k)$$

〈Newton法のアルゴリズム〉

$\boldsymbol{x}_0$ をとる;

$k = 0, 1, 2, \cdots$ に対して

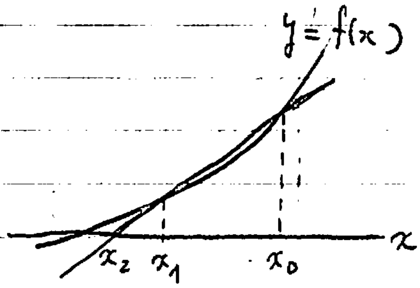
$\Delta\boldsymbol{x} = -J^{-1}(\boldsymbol{x}_k)\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_k)$;

$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \Delta\boldsymbol{x}_k$;

$\boldsymbol{x}_{k+1}$ が真の解 $\boldsymbol{x}^*$ に十分近いと判定したら,

反復を止めて $\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{x}_{k+1}$ を返す;

〈割線法（セカント法）〉



$$\frac{f(x_1)}{x_1 - x_2} = \frac{f(x_0) - f(x_1)}{x_0 - x_1}$$

より

$$x_1 - x_2 = \frac{x_0 - x_1}{f(x_0) - f(x_1)} f(x_1),$$

$$x_2 = x_1 - \frac{x_0 - x_1}{f(x_0) - f(x_1)} f(x_1).$$

〈アルゴリズム〉

x_0, x_1 をとる;
$k = 1, 2, \cdots$ に対して

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_{k-1} - x_k}{f(x_{k-1}) - f(x_k)} f(x_k);$$

x_{k+1} が真の解 x^* に十分近いと判定されたら、反復を止めて $x^* = x_{k+1}$ を返す;

(注) $$x_{k+1} = \frac{x_k f(x_{k-1}) - x_{k-1} f(x_k)}{f(x_{k-1}) - f(x_k)}$$

とすると、桁落ちが生じるので、この式は使わない方がよい.

代数方程式に対するDK法

代数方程式

$$p(z) = a_0 z^n + a_1 z^{n-1} + \cdots + a_{n-1} z + a_n$$
$$= a_0 (z-\alpha_1)(z-\alpha_2)\cdots(z-\alpha_n) = 0.$$

Newton法を適用 $z_j^{(\nu)} \to \alpha_j \quad (j \to \infty)$

$$z_j^{(\nu+1)} = z_j^{(\nu)} - \frac{p(z_j^{(\nu)})}{p'(z_j^{(\nu)})},$$

$$p'(z_j^{(\nu)}) = a_0 \sum_{k=1}^{n} \prod_{l \neq k} (z_j^{(\nu)} - \underbrace{\alpha_l}_{z_l^{(\nu)}})$$

$z_l^{(\nu)}$ とする. → DK法

<DK法 (Durand-Kerner法)>

$z_1^{(0)}, \cdots, z_n^{(0)}$ を適当に選ぶ;

$\nu = 0, 1, 2, \cdots$ に対し

$$\left[\; z_j^{(\nu+1)} = z_j^{(\nu)} - \frac{p(z_j^{(\nu)})}{a_0 \prod_{k \neq j} (z_j^{(\nu)} - z_k^{(\nu)})} \right. \qquad (j = 1, 2, \cdots, n);$$

$z_1^{(\nu)}, \cdots, z_n^{(\nu)}$ が十分真の解に近づけば、二次収束する.

つまり、$\varepsilon_j^{(\nu)} = z_j^{(\nu)} - \alpha_j^{(\nu)}$ とおくと、

$$\varepsilon_j^{(\nu+1)} \approx C \varepsilon_j^{(\nu)2}.$$

* 根と係数の関係を $\alpha_1, \cdots, \alpha_n$ に関する連立一次方程式とみなして Newton法を適用すると、DK法の算法が得られる (→後述).

* 多項式の計算 → Horner法

$$p(z) = a_0 z^n + a_1 z^{n-1} + \cdots + a_{n-1} z + a_0$$
$$= ((\cdots((a_0 z + a_1) z + a_2) z + \cdots) z + a_{n-1}) z + a_n.$$

$p := a_0;$
$k = 0, 1, \cdots, n-1$ に対して
[$p := z p + a_{k+1};$ → $p(z) = p$

<3次DK法>

$$p(z) = a_0 \prod_{j=1}^{m} (z - \alpha_j).$$

対数微分

$$\frac{p'(z)}{p(z)} = \sum_{k=1}^{m} \frac{1}{z-\alpha_k} = \frac{1}{z-\alpha_j} + \sum_{k\neq j} \frac{1}{z-\alpha_k},$$

$$\alpha_j = z - \cfrac{1}{\cfrac{p'(z)}{p(z)} - \displaystyle\sum_{k\neq j} \cfrac{1}{z-\alpha_k}}.$$

右辺で $z = z_j^{(\nu)}$, $\alpha_j = z_j^{(\nu+1)}$ とおく

$\downarrow$

<u>3次のDK法</u>

$z_1^{(0)}, \cdots, z_m^{(0)}$ を適当に選ぶ;

$\nu = 0, 1, 2, \cdots$ に対し

$$\left[\; z_j^{(\nu+1)} = z_j^{(\nu)} - \cfrac{p(z_j^{(\nu)})/p'(z_j^{(\nu)})}{1 - \cfrac{p(z_j^{(\nu)})}{p'(z_j^{(\nu)})} \displaystyle\sum_{k\neq j} \cfrac{1}{z_j^{(\nu)} - z_k^{(\nu)}}} \right. ;$$

これは3次収束する: $\varepsilon_j^{(\nu+1)} \approx C\, {\varepsilon_j^{(\nu)}}^{3}$

・初期解 $z_1^{(0)}, \cdots, z_m^{(0)}$ のとり方 … <u>Aberthの初期値</u>

$$z_j^{(0)} = \beta + R \exp\left[\frac{i}{m}\left(2\pi(j-1) + \underbrace{\tfrac{3}{2}}_{\text{わざと対称性を崩す}}\right)\right],$$

ここで

$$\beta = \frac{\alpha_1 + \cdots + \alpha_m}{m} = -\frac{a_1}{m a_0} \quad (\text{根}\,\alpha_1, \cdots, \alpha_m\,\text{の重心})$$

・円の半径 R のとり方: $z = \beta + \zeta$ とおく。

$$g(\zeta) \equiv p(\beta+\zeta) = c_0 \zeta^m + c_1 \zeta^{m-1} + \cdots + c_m$$

とおいて、R を $g(\zeta) = 0$ の根の絶対値より大きくとりたい。

ところで、方程式

$$|c_0|\, x^m - |c_1|\, x^{m-1} - \cdots - |c_m| = 0 \quad \text{——①}$$

は $x \geq 0$ で唯一の根 x^* をもち、$|g(\zeta)=0\,\text{の根}| \leq x^*$ である。

よって、$R = x^*$ ととる(①の根はNewton法で求める)。

根と係数の関係にNewton法を適用するとDK法が得られることを、$n=2$ 次方程式の場合に確認する。

$$\begin{cases} f_1(z_1, z_2) \equiv z_1 + z_2 + \dfrac{\alpha_1}{a_0} = 0 \\ f_2(z_1, z_2) \equiv z_1 z_2 - \dfrac{\alpha_2}{a_0} = 0 \end{cases} \qquad —①$$

Newton法自体

$$f_1(z_1^{(\nu)} + \Delta z_1^{(\nu)}, z_2^{(\nu)} + \Delta z_2^{(\nu)}) \approx f_1(z_1^{(\nu)}, z_2^{(\nu)}) + \frac{\partial f_1}{\partial z_1}(z_1^{(\nu)}, z_2^{(\nu)}) \Delta z_1^{(\nu)} + \frac{\partial f_1}{\partial z_2}(z_1^{(\nu)}, z_2^{(\nu)}) \Delta z_2^{(\nu)},$$

$$f_2(z_1^{(\nu)} + \Delta z_1^{(\nu)}, z_2^{(\nu)} + \Delta z_2^{(\nu)}) \approx f_2(z_1^{(\nu)}, z_2^{(\nu)}) + \frac{\partial f_2}{\partial z_1}(z_1^{(\nu)}, z_2^{(\nu)}) \Delta z_1^{(\nu)} + \frac{\partial f_2}{\partial z_2}(z_1^{(\nu)}, z_2^{(\nu)}) \Delta z_2^{(\nu)}.$$

①を代入して、

$$\begin{cases} z_1^{(\nu)} + z_2^{(\nu)} + \dfrac{\alpha_1}{a_0} + \Delta z_1^{(\nu)} + \Delta z_2^{(\nu)} = 0 \\ z_1^{(\nu)} z_2^{(\nu)} - \dfrac{\alpha_2}{a_0} + z_2^{(\nu)} \Delta z_1^{(\nu)} + z_1^{(\nu)} \Delta z_2^{(\nu)} = 0 \end{cases}$$

$$\therefore \begin{cases} \Delta z_1^{(\nu)} + \Delta z_2^{(\nu)} = -z_1^{(\nu)} - z_2^{(\nu)} - \dfrac{\alpha_1}{a_0}, & —(1) \\ z_2^{(\nu)} \Delta z_1^{(\nu)} + z_1^{(\nu)} \Delta z_2^{(\nu)} = -z_1^{(\nu)} z_2^{(\nu)} + \dfrac{\alpha_2}{a_0}. & —(2) \end{cases}$$

$(1) \times z_1^{(\nu)} - (2)$ をつくる。

$$(z_1^{(\nu)} - z_2^{(\nu)}) \Delta z_1^{(\nu)} = -z_1^{(\nu)2} - \frac{\alpha_1}{a_0} z_1^{(\nu)} - \frac{\alpha_2}{a_0} = -\frac{p(z_1^{(\nu)})}{a_0}$$

$$\Delta z_1^{(\nu)} = -\frac{p(z_1^{(\nu)})}{a_0 (z_1^{(\nu)} - z_2^{(\nu)})}.$$

同様にして、 $\Delta z_2^{(\nu)} = -\dfrac{p(z_2^{(\nu)})}{a_0 (z_2^{(\nu)} - z_1^{(\nu)})}.$ ☒