特異解の近傍における Newton 法の挙動

山本 哲朗(愛媛大・理)

1. はじめに

Banach 空間 X における方程式

$$F(x)=0 \tag{1}$$

が特異解 x^* をもつものとする。このとき,x^* の近傍から出発する Newton 法

$$x_{k+1}=x_k-[F'(x_k)]^{-1}F(x_k),\quad k=0,1,2,\cdots \tag{2}$$

の収束は,一般に期待されない。しかし,$[F'(x)]^{-1}$ が $X\setminus\{x^*\}$ あるいは $U\setminus\{x^*\}$ (U は x^*の適当な近傍)において存在するならば,(2) が定義され,解 x^* に収束する場合が起り得る。たとえば,$X=\mathbb{R}$,$F(x)=x^2$ の場合,$x^*=0$ は 2重根であるが,$X\setminus\{0\}$ で $F'(x)\neq 0$ かつ Newton 法は

$$x_{k+1}=\frac{1}{2}x_k\to 0\ (k\to\infty)$$

となって解 x^* に収束する。したがって,次の事項は,我々にとって,きわめて興味ある研究課題である。

(I) (2) が収束するとき,その挙動はどのようであろうか。

(II) それよりも,一体,どのような条件の下で,$\{x_k\}$ は収束するであろうか。

$X=\mathbb{R}^n$ または $\mathbb{C}^n$ に対し,(I) に対する解答はすでに 1966年 Rall [5] により与えられた。彼の結論は,々>粗く

"x^* が m 重根 ($m>1$) ならば,$\{x_k\}$ は縮小率 $1-\frac{1}{m}$ の線形収束である"

と要約することができる。したがって,(II) と並んで次の問題は実用上重要なものとなる。

(III) 列 $\{x_k\}$ を加速すること。

(IV) (1) をさらに高次な空間に埋め込んで,x^*の特異性を消去すること

特異解 ($F'(x^*)$ が可逆でない) に対する Newton 法の研究は,最近,Rall の結果を踏み台として,上記 (II) 〜 (IV) をめぐって展開されている。以下,最も基本的な Rall の結果および,近年,Reddien,Decker−Kelley,Griewank−Osborne,Weber−Werner 等によりえられている結果の大要を紹介したい。

2. 特異解へ収束する Newton 列の挙動

この節では,$X=\mathbb{R}^n$ または $\mathbb{C}^n$ とし

$$x=(x_1,\cdots,x_n),$$

$$F(x)=(F_1(x),\cdots,F_n(x))\in C^{m+1}(U)$$

$$F^{(s)}(x)=\left(\frac{\partial^s F_i(x)}{\partial x_{j_1}\cdots\partial x_{j_s}}\right),\quad i,j_1,\cdots,j_s=1,2,\cdots,n$$

$$N(F'(x^*))=\{x\in X\mid F'(x^*)x=0\}$$

等とあらわす。

定義１（Rall）．解 x^* の重複度が m であるとは，

$$N_1 = N(F'(x^*)),\quad N_{i+1} = N_i \cap N(F^{(i+1)}(x^*)),\ i=1,2,\cdots$$
$$d_i = \dim N_i$$

として，$d_i \geqq 1\ (1 \leqq i \leqq m-1)$，$d_m = 0$ のときをいう．

$N_1 \neq X$ ならば，適当な部分空間 X_1 をとって

$$X = X_1 \oplus N_1,\quad F'(x^*) \text{ は } X_1 \text{ 上 正則（可逆）},\quad X_1 = R(F'(x^*))\ (\text{値域})$$

とできる．ここで，$X_1 \neq \{0\}$ ならば，N_1 を X と考え，$N_2 \neq N_1$ ならば

$$N_1 = X_2 \oplus N_2,\quad F''(x^*) \text{ は } X_2 \text{ 上正則},$$

なる X_2 がとれる．以下これを続けて

$$X = X_1 \oplus X_2 \oplus \cdots \oplus X_m,\quad X_m = N_{m-1}\quad (N_m = \{0\}) \tag{3}$$

と分解するとき，次のことが成り立つ．

定理１（Rall 1966）．$\varepsilon_k = x_k - x^*$ を (3) により

$$\varepsilon_k = \sum_{s=1}^{m} \xi_k^{(s)},\quad \xi_k^{(s)} \in X_s$$

とあらわせば

$$\varepsilon_{k+1} = \sum_{s=1}^{m} \left(1 - \frac{1}{s}\right)\xi_k^{(s)} + \delta_{k+1},\quad \|\delta_{k+1}\| = O(\|\varepsilon_k\|^2)$$

したがって

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|\xi_{k+1}^{(s)}\|}{\|\xi_k^{(s)}\|} = 1 - \frac{1}{s}\quad (1 \leqq s \leqq m)\quad \text{かつ}\quad \|\xi_{k+1}^{(1)}\| = O(\|\varepsilon_k\|^2)$$

3．収束するための十分条件

以下，X を Banach 空間，$F: X \to X$ を C^3 級，

$$X = X_1 \oplus N_1,\quad X_1: \text{閉},\quad X_1 = R(F'(x^*))$$

P_{X_1}：X_1 上への射影子

$$P_{N_1} = I - P_{X_1}$$

$$B_\rho(x^*) = \{x \in X \mid \|x - x^*\| \leqq \rho\}$$

$$C_\theta(x^*) = \{x \in X \mid \|P_{X_1}(x - x^*)\| \leqq \theta \|P_{N_1}(x - x^*)\|\}$$

$$W_{\rho,\theta}(x^*) = B_\rho(x^*) \cap C_\theta(x^*)$$

と仮定する．（$U \setminus \{x^*\}$ における $F'(x)$ の正則性は仮定しない．）

定理２（Reddien 1978）上の仮定に加えて，次のことを仮定する．

(A1) $\dim N_1 = 1$

(A2) $F''(x^*) N_1 N_1 \cap X_1 = \{0\}$

(A3) $\|F''(x^*) u x\| \geqq c_1 \|u\| \cdot \|x\|$ （${}^\forall u \in N_1, {}^\forall x \in X$）なる正定数 c_1 が存在する．

このとき，次のことが成り立つ．

(i) 適当な $\rho > 0$ と $\theta > 0$ をとれば，$F'(x)$ は $W_{\rho,\theta}(x^*) \setminus \{x^*\}$ で正則で

$$\|[F'(x)]^{-1}\| \leqq \frac{c_2}{\|x - x^*\|}\quad (c_2: \text{適当な定数})$$

(ii) $x_0 \in \overline{W}_{\rho,\theta}(x^*)$ ならば $x_k \in \overline{W}_{\rho,\theta}(x^*)$ かつ $x_k \to x^*$

(iii) $\| P_{X_1}(x_{k+1}-x^*)\| = O(\|x_k - x^*\|^2)$

(iv) $\displaystyle\lim_{k\to\infty} \frac{\|P_{N_1}(x_{k+1}-x^*)\|}{\|P_{N_1}(x_k - x^*)\|} = \frac{1}{2}$

(v) x^* は $B_\rho(x^*)$ 内における (1) の一意解

定理3(Reddien 1979). L を N_1 の1次元空間,

$$T_\phi(x^*) = \{x \in X \mid \|(I-P_L)P_{N_1}(x-x^*)\| \leqq \phi \|P_{N_1}(x-x^*)\|\}$$

$$\overline{W}_{\rho,\theta,\phi}(x^*) = \overline{W}_{\rho,\theta}(x^*) \cap T_\phi(x^*)$$

とおき,次のことを仮定する.

(A'1) $\dim N_1 \geqq 1$

(A'2) $F''(x^*)LN_1 \cap X_1 = \{0\}$

(A'3) $\|F''(x^*)vy\| \geqq c_3\|v\|\cdot\|y\|$ ($\forall v \in L, \forall y \in X$) なる正定数 c_3 が存在する.

このとき,適当な正定数 ρ, θ, ϕ, λ をとれば

(i') $F'(x)$ は $\overline{W}_{\rho,\theta,\phi}(x^*) \setminus \{x^*\}$ で正則であり

$$\|[F'(x^*)]^{-1}\| \leqq \frac{c_4}{\|x-x^*\|} \quad (c_4 : \text{正定数})$$

(ii') $x_0 \in T_\lambda(x^*)$ ならば, $x_k \in \overline{W}_{\rho,\theta,\phi}(x^*)$ かつ $x_k \to x^*$

(iii') $\|P_{X_1}(x_{k+1}-x^*)\| = O(\|x_k - x^*\|^2)$

(iv') $\displaystyle\lim_{k\to\infty} \frac{\|P_{N_1}(x_{k+1}-x^*)\|}{\|P_{N_1}(x_k - x^*)\|} = \frac{1}{2}$

定理2は次のように改良された.

定理4 (Decker-Kelley 1980) 次の仮定の下で,定理2の結論が成り立つ.

(B1) $1 \leqq \dim N_1 < \infty$

(B2) $B(z) = -P_{N_1}F''(x^*)zP_{N_1}[\ \ ] : N \to N$ は,すべての $z \in N_1 \setminus \{0\}$ につき正則.

注意1. (A1), (A2) ⇒ (B2) が成立する. 実際, $B(z)u = 0$, $u \in N_1$ とすれば

$P_{N_1}F''(x^*)zu = 0$ ∴ $F''(x^*)zu \in X_1$

∴ $F''(x^*)zu \in X_1 \cap F''(x^*)NN = \{0\}$

∴ $0 = \|F''(x^*)zu\| \geqq c_1\|z\|\|u\|$, $z \neq 0$ ∴ $u = 0$

その後, Decker-Kelley [2] は, F が C^4 級のとき, 上の結果をさらに拡張している. また, Griewank-Osborne [4] は, $X = \mathbb{R}^n$ または $\mathbb{C}^n$ のとき

$Q_{N_1} : N_1^* = N(F'(x^*)^t)$ 上への直交射影

$Q_{X_1} = I - Q_{N_1}$,

$X_1 = N_1^\perp$, $X_1^* = N_1^{*\perp}$

$B(z) = Q_{N_1}F''(x^*)zP_{N_1}[\ \ ] : N_1 \to N_1^*$

として，次の結果を証明している。（原論文の結果はさらに精密である。）

定理5（Griewank–Osborne 1981）

$$v_k = \| P_{N_1}(x_k - x^*) \|,\quad V_k = \| P_{X_1}(x_k - x^*) \|,\quad t_0 = \frac{1}{v_0} P_{N_1}(x_0 - x^*)$$

とおく。 $B(t_0)$ が正則で，v_0, V_0 が充分小ならば，Newton法は定義され

$$x_k \to x^* \ (k \to \infty) \quad \text{かつ} \quad \lim_{k\to\infty} \frac{v_{k+1}}{v_k} = \frac{1}{2}$$

4. 加速法

Rall［5］および Decker–Kelley［3］を参照されたい。

5. 特異性の解消

実Banach空間 X における方程式（1）に対し，直積空間 $E = X \times X \times R$ における方程式

$$G(\zeta) = \begin{pmatrix} F(x) + \lambda p \\ F'(x)p \\ a(p,p) - 1 \end{pmatrix} = 0, \quad \zeta = (x, p, \lambda) \in E \tag{4}$$

を考える。ただし，$x, p \in X$, $\lambda \in R$, $F \in C^3(X)$ とし，$a(p,p)$ は $X \times X$ 上の正値対称双線形形式である。 このとき，G は C^2 級で，$a(v,v) = 1$ なる v に対し $\zeta^* = (x^*, v, 0)$ を解にもつ。簡単な計算により

$$G'(\zeta) = \begin{pmatrix} F'(x) & \lambda & p \\ F''(x)[\ ]p & F'(x) & 0 \\ 0 & 2a(p,[\ ]) & 0 \end{pmatrix}$$

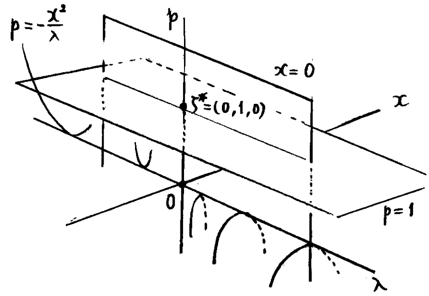
次のことが成り立つ。 したがって，x^* を精密に求めることができる。

定理6（Weber–Werner 1981） 定理2の仮定の下で $G'(\zeta^*)$ は正則である。 したがって，孤立解 ζ^* を Newton法その他により求めることができる。

注意2. 方程式（4）は Sydel［8］も考えている。 また，最近山本範［10］は，$X = R^n$ または C^n に対し，同一の方程式（4）を考え，定理6を発展させた議論を展開している。

注意3. $X = R$, $f = x^2$ の場合 定理6 のアイデアを右図に示す。この場合，$x^* = 0$,

$$G(x, p, \lambda) = \begin{pmatrix} x^2 + \lambda p \\ 2xp \\ p^2 - 1 \end{pmatrix} = 0. \quad \zeta^* = (0, \pm 1, 0)$$



注意4. §3 の結果は理論的なものであって，有限桁計算においては，桁落ち等のため，かならずしも成り立たない。 実例は当日示す。

6. 附記

§2で述べた事実

"X が有限次元空間で，$N_1 \neq X$ ならば

$$X = N_1 \oplus X_1,\quad X_1 = R(F'(x^*)),\quad F'(x^*) \text{ は } X_1 \text{ 上正則}$$

なる部分空間 X_1 が存在する。"

の証明は，Rall の論文には与えられていない。 また，§3 における Reddien, Decker-Kelley 等の結果は，この事実を仮定している。（無限次元空間では，この命題はかならずしも成立しない。） ここで，その証明を与えておく。

$\dim X = n$ とし，N_1，$N_1^{\perp}$ の基底をそれぞれ $\{u_1, \cdots, u_\alpha \ (\alpha = d_1 < n)\}$，$\{v_1, \cdots, v_\beta\}$ $(\alpha + \beta = n)$ とする。 これらの基底により，線形変換 $F'(x^*)$ を表現すれば

$$F'(x^*)(u_1, \cdots, u_\alpha, v_1, \cdots, v_\beta) = (u_1, \cdots, u_\alpha, v_1, \cdots, v_\beta)\begin{pmatrix} 0 & L_{12} \\ 0 & L_{22} \end{pmatrix}$$

とかける。 ここに，L_{12} は $\alpha \times \beta$ 行列，L_{22} は $\beta \times \beta$ 行列である。 明らかに，$F'(x^*)$ は $N_1^{\perp}$ 上正則（∵ $F'(x^*)u = 0$，$u \in N_1^{\perp}$ なら $u \in N_1^{\perp} \cap N_1 = \{0\}$）であるから，$L_{22}$ は正則である。 故に $S = -L_{12} L_{22}^{-1}$ とおき，行列

$$T = \begin{pmatrix} I_\alpha & S \\ 0 & I_\beta \end{pmatrix}$$

をつくれば

$$T\begin{pmatrix} 0 & L_{12} \\ 0 & L_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & L_{22} \end{pmatrix} \quad \text{かつ} \quad T^{-1} = \begin{pmatrix} I_\alpha & -S \\ 0 & I_\beta \end{pmatrix}$$

いま

$$w = (u_1, \cdots, u_\alpha, v_1, \cdots, v_\beta)T^{-1} = (u_1, \cdots, u_\alpha, z_1, \cdots, z_\beta)$$

とおけば，$u_1, \cdots, u_\alpha, z_1, \cdots, z_\beta$ は一次独立であり

$$F'(x^*)w = wT\begin{pmatrix} 0 & L_{12} \\ 0 & L_{22} \end{pmatrix}T^{-1} = w\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & L_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} I_\alpha & -S \\ 0 & I_\beta \end{pmatrix} = w\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & L_{22} \end{pmatrix}$$

このとき，$z_1, \cdots, z_\beta$ で張られる空間を X_1 とすれば，上のことより

$$X = N_1 + X_1$$

しかし，右辺は直和となっている。 実際

$$x \in N_1 \cap X_1 \Rightarrow x = \sum_{j=1}^{\beta} c_j z_j \quad (c_j \text{ は定数}) \text{ とかける.}$$

$z_j = v_j - \sum_{i=1}^{\alpha} s_{ij} u_i$ （s_{ij} は S の (i, j) 要素）を上式右辺に代入して

$$x = \sum_{j=1}^{\beta} c_j \{v_j - \sum_{i=1}^{\alpha} s_{ij} u_i\}$$

$$\therefore \sum_{j=1}^{\beta} c_j v_j = x + \sum_{j=1}^{\beta}\sum_{i=1}^{\alpha} c_j s_{ij} u_i$$

右辺は N_1 の元であり，左辺は $N_1^{\perp}$ の元であるから $\sum_{j=1}^{\beta} c_j v_j = 0$ $\quad \therefore c_j = 0$

$$\therefore x = 0 \qquad \therefore N_1 \cap X_1 = \{0\}$$

次に $R(F'(x^*)) = X_1$ を示す。

$$F'(x^*)w = w\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & L_{22} \end{pmatrix}$$

より　$F'(x^*)X_1 \subset X_1$　は明らかである。
次に　$\forall z = \sum_{j=1}^{\beta} c_j z_j \in X_1$　に対し　$L_{22}(\xi_1, \cdots, \xi_\beta)^t = (c_1, \cdots, c_\beta)^t$　なる $\xi_1, \cdots, \xi_\beta$ をとれば

$$F'(x^*)\left(\sum_{j=1}^{\beta} \xi_j z_j\right) = F'(x^*)(z_1, \cdots, z_\beta)\begin{pmatrix}\xi_1\\ \vdots \\ \xi_\beta\end{pmatrix}$$

$$= (z_1, \cdots, z_\beta) L_{22}\begin{pmatrix}\xi_1\\ \vdots \\ \xi_\beta\end{pmatrix}$$

$$= (z_1, \cdots, z_\beta)\begin{pmatrix}c_1\\ \vdots \\ c_\beta\end{pmatrix} = z$$

故に　$F'(x^*)X_1 = X_1$　となって　証明が終了する。

文　献

1.Decker,D.W. and Kelley,C.T.: Newton's method at singular points.I, SIAM J.Numer. Anal. 17(1980),66-70

2.Decker,D.W. and Kelley,C.T.: Newton's method at singular points.II, SIAM J.Numer. Anal. 17(1980),465-471

3.Decker,D.W. and Kelley,C.T.: Convergence acceleration for Newton's method at singular points, SIAM J.Numer.Anal. 19(1981), 219-229

4.Griewank,A. and Osborne,M.R.:Newton's method for singular problems when the dimension of the null space is > 1, SIAM J.Numer.Anal.18(1981),145-149

5.Rall,L.B.:Convergence of the Newton process to multiple solutions,Numer.Math.9 (1966),23-37

6.Reddien,G.W.:On Newton's method for singular problems, SIAM J.Numer.Anal.15(1978) 993-996

7.Reddien,G.W.: Newton's method and high order singularities, Comp.& Maths. with Appls. 5(1979),79-86

8.Seydel,R.: Numerical computation of branch points in nonlinear equations,Numer. Math. 33(1979),339-352

9.Weber,H. and Werner.W.: On the accurate determination of nonisolated solutions of nonlinear equations, Computing 26(1981), 315-326

10.N.Yamamoto: Newton's method for singular problems and its application to boundary value problems, preprint

（附記の附記）　上記証明は，初等的ではあるが，少々冗長すぎたきらいがある。
もし

$$\dim R(F'(x^*)) = n - \dim N_1 = \dim N_1^{\perp}$$

なる事実を既知とするならば，適当な正則変換 T により，$TN_1^{\perp} = R(F'(x^*))$　とできて，

$$X = N_1 \oplus X_1, \qquad X_1 = TN_1^{\perp}$$

とかけることは明らかである。　§6の証明は，本質的には，上の事実をきちんと証明しているにすぎない。