

漸化式で表される多項式のゼロ点について

日本大学生物資源科学部 五十嵐正夫 (Masao IGARASHI)

1 はじめに

代数方程式や超越方程式が多重解や近接解を持つ場合、その数値解の精度桁数は、特別な場合を除いて、計算桁数よりも少なくなることは、よく知られたことである。その理由は、一般に次のように説明される。代数方程式を例にとり説明する。

$$f(z) = a_n z^n + a_{n-1} z^{n-1} + \dots + a_1 z + a_0 \quad (1)$$

この方程式の数値解を例えば次の Newton-Raphson 法

$$z_{k+1} = z_k - \frac{f(z_k)}{f'(z_k)} \quad (2)$$

で求めるとする。数値解 z_k が $f(z) = 0$ の解に接近するにつれて、 $f(z_k)$ の精度桁数は徐々に減少する。ここで反復は、何らかの方法で計算値 $f(z_k)$ の精度桁数を評価し、その精度桁数が喪失したときに、停止するものとする。 z_k が接近する厳密解を α とし、 $f(z_k) = (z_k - \alpha)g(z_k)$ とおく。通常は $(z_k - \alpha)$ での桁落ち数が、計算桁数とほぼ同程度になったとき、反復は停止する。しかしながら、 α の近傍に解があると、数値解 z_k は同時にその解にも接近するから、 $g(z_k)$ も桁落ちを起こす。そのため、 $(z_k - \alpha)$ での桁落ち数が、計算桁数に達する前に $f(z_k)$ は精度桁数を喪失し、反復は停止する。すなわち、 α の近辺に解があつたり、 α が多重解である時の数値解の精度桁数は、計算桁数ほどは望めないことになる。定性的には、
” $f(z) = g(z)(z - \alpha)$ の時、 α の数値解 $z(\alpha)$ の精度桁数の上限は計算桁数から $g(z(\alpha))$ の非精度桁数を減じたものである ”

と言える。また、事後評価的には次のことが言える。

M 桁計算において、 α_l の数値解 $z(l) \neq 0$ の精度桁数 $AD(z(l))$ は次のよう見積もることができる。

$$AD(z(l)) = M + \sum_{j=1, j \neq l, \log_{10} \left| \frac{z(j) - \alpha_l}{\alpha_l} \right| < 0}^n \log_{10} \left| \frac{z(j) - \alpha_l}{\alpha_l} \right| \quad (3)$$

例題 1 $f(z) = (z - 11)(z - 12)(z - 13)(z - 14)(z - 15)(z - 15)$ のゼロ点を 10 進 16 桁計算 (倍精度計算) で求めるとする。いま仮に $\alpha = 15$ に対する数値解 $z(15)$ が求めたとする。計算値 $f(z(15))$ の誤差を利用した反復停止則を用いれば、反復が停止したとき $f(z(15))$ の精度桁数はゼロである。

$$f(z(15)) = (z(15) - 11)(z(15) - 12)(z(15) - 13)(z(15) - 14)(z(15) - 15)(z(15) - 15)$$

であるから、各 $z(15) - 11, z(15) - 12, z(15) - 13, z(15) - 14, z(15) - 15, z(15) - 15$ の計算における桁落ち数の合計は 16 桁程度と見積もることができる。 $z(15) = 15.xxxx$ となっているはずであるから、各 $z(15) - 11, z(15) - 12, z(15) - 13, z(15) - 14$ では 1 桁程度の桁落ちと見積もれる。また $z(15) - 15$ と $z(15) - 15$ では同じ桁落ち数 L と見積もれるから、 $4 + 2L \approx 16$ より $L \approx 6$ と評価できる。すなわち、 $\alpha = 15$ に対する数値解の精度

桁数限界は、倍精度計算においては6桁程度と見積もることができる。図1は減次による誤差を防ぐために例題1を次のDurand-Karner法で求めた結果である[6]。

$$z_{k+1}(l) = z_k(l) - \frac{f(z_k(l))/a_n}{\prod_{j=1, j \neq l}^n (z_k(l) - z_k(j))} \quad l = 1, \dots, n, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (4)$$

y 軸には精度桁数、 x 軸には左から順に厳密解 11,12,13,14,15,15 の数値解と(3)式による評価値を示してある。

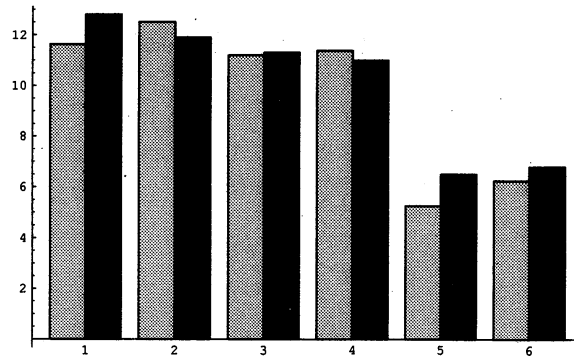


図1：例題1の数値解結果（灰色は数値解、黒色は(3)による評価値）

多重解や近接解の数値解に対する、精度限界については[1],[3],[5],[7]等で考究しつくされた感があり、(1)の計算方法や(2)の補正項の計算方法をどのように工夫しても、一連の計算における計算桁数を一定とした場合、結果は変わらない、と言うのが定説であった。しかしながら、(1)の $f(z)$ が漸化式計算できる場合、近接解であっても、計算桁数と同程度の精度桁数を有する数値解が得られる場合がある。本小論では、ある種の直交多項式系についてその原因を調べてみる。

2 多項式の計算方法

よく知られている多項式の計算方法として、次の3つがある。

$$f(z) = (\dots((a_n z + a_{n-1})z + a_{n-2})z \dots)z + a_0 \quad (5)$$

$$f(z) = [(\dots((a_n z + a_{n-1})z + a_{n-2})z \dots)z + a_m + (\dots((a_0 z + a_1)/z + a_3)/z \dots)/z] * z^{n-m} \quad (6)$$

$$f(z) = a_n z^n + a_{n-1} z^{n-1} + \dots + a_1 z + a_0 \quad (7)$$

(5)は組立除法と呼ばれる方法であり、導関数も同時に計算でき、最も一般的な計算方法である。(6)は計算のあふれを防止するために考えられた[2]。(7)の計算式をあえてあげた理由は、経験的には(5)による計算値とほとんど計算精度が変わらないからである。それらに加え、ある種の特別な多項式に適用できる、

$$f(z) \text{ を漸化式計算する} \quad (8)$$

方法を考える。その例として、Legendre 多項式、Chebyshev 多項式、Hermite 多項式、Laguerre 多項式などの直交多項式系を取り上げる。

先ず多項式の計算方法により、得られる数値解の精度が、第1節で述べた結果に当てはまらない数値例を2つあげ、その理由を考察しておく。

例題2：2重解の問題 $f(z) = z^2 - 2z + 1$, 初期値 $z_0 = 2$

この多項式のゼロ点を次の2通りのNewton-Raphson法によって計算した結果を図2と図3に示す。異なる点は、 $f(z)$ の計算方法のみであるが、(10)の計算式では、計算桁数と同程度の精度桁を持つ数値解が得られている。初期値を変えても同様な結果が得られる。

$$z_{k+1} = z_k - \frac{(z_k - 2)z_k + 1}{2z_k - 2} \quad (9)$$

$$z_{k+1} = z_k - \frac{(z_k - 1)(z_k - 1)}{2z_k - 2} \quad (10)$$

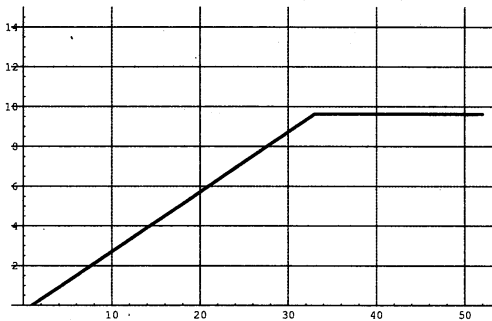


図2：(9)式による精度桁数の変化

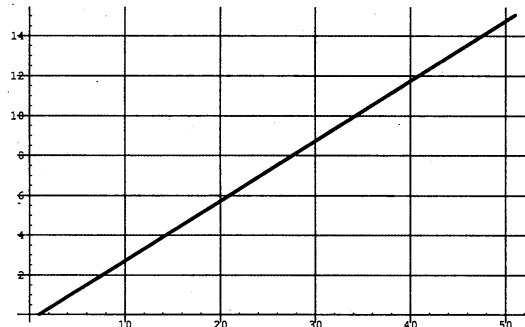


図3：(10)式による精度桁数の変化

(9)式と(10)式での精度桁数の差異の理由は次のように説明できる。(10)式に表れる分子の計算は積計算のため、桁落ちによる精度桁数の喪失がないからである。例えば $(z_k - 1)$ で6桁の桁落ちがあったとしても、 $(z_k - 1)$ と $(z_k - 1)$ の積においては、桁落ちは起きないから、 $f(z_k)$ は依然として10桁(倍精度計算)程度の精度を有するためである。Wilkinsonの浮動小数点演算の丸め誤差表現に従えば、 $(z_k - 1)$ と $(z_k - 1)$ の積は $(z_k - 1)(z_k - 1)(1 + \epsilon)$ となるから、桁落ちによる非精度桁数の増加はないことになる。ここで ϵ は計算機 ϵ である。

ここで一つ注意を与えておく。(10)の分子のように $f(z)$ を計算することは、厳密解の原点移動である。理論的には $z^2 - 2z + 1 = 0$ の解を計算しているわけであるが、数値的には $z^2 = 0$ の解を計算していることになる。このことは一般に、 n 重解の数値的な性質を論じるのに、 $z^n = 0$ の数値例を用いることは適当でないことを示している。

例題3：Wilkinsonの悪条件の問題 次の数値例は悪条件らしくない悪条件の例題として、有名である[7]。

$$f(z) = (z - 1)(z - 2) \cdots (z - 18)(z - 19)(z - 20) = 0$$

この方程式の解20を、(2)の反復式で求めることを考える。ただし反復式に現れる分子の計算は例題2と同様、2通りの方法で計算するものとする。すなわち $f(z_k)$ 組立除法と $(z_k - 1)(z_k - 2)(z_k - 3) \cdots (z_k - 20)$ の形で計算するものとする。数値結果を図4に示す。

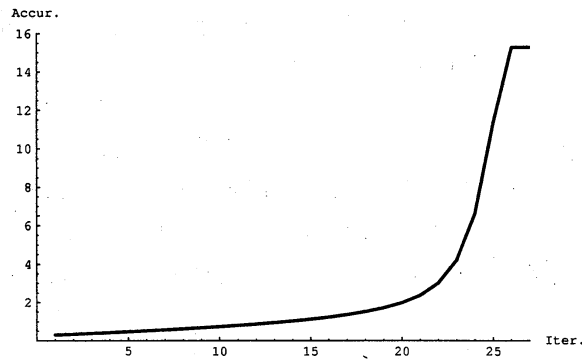


図 4 : 精度桁数増加の様子 (倍精度, 厳密解 20)

$f(z_k)$ を組立除法で計算した場合は、(3) 式による評価結果に当てはまる数値解が得られているが、 $f(z_k)$ を $(z_k - 1)(z_k - 2)(z_k - 3) \cdots (z_k - 20)$ の形で計算した場合は、計算桁数と同程度の精度を有する数値解が得られている。初期値を変え、近接する他の厳密解について数値実験しても、同様な結果が得られる。近接解を持つこの数値例の結果も、例題 2 と同様に説明できる。すなわち厳密解 20 に対する数値解 z_k に対して、 $(z_k - 1)(z_k - 2)(z_k - 3) \cdots (z_k - 20)$ の形で $f(z_k)$ を計算すると、 $f(z_k)$ の桁落数は、項 $(z_k - 20)$ の桁落ち数に等しいからである。

例題 2、3 とも厳密解が分かっていることより、因数分解を利用して厳密解と同程度の精度桁数のある数値解を得ているわけである。しかしながら多項式が漸化式で計算される場合は、必ずしも厳密解が分かっている必要はない。

3 直交多項式系

n 次の Chebyshev 多項式のゼロ点は

$$\alpha_{n,k} = \cos \frac{2k-1}{2n} \pi, \quad k = 1, 2, \dots, n$$

であるから、次数が高くなると $z = \pm 1$ の近辺にはゼロ点が密集する。第一節で述べた理由により、その近辺での数値解の精度は次数の増加とともに減少する。しかしながら、Chebyshev の多項式を漸化式計算すると、450 次程度 (倍精度計算) まで、ほぼ完璧な数値解が求まる。この節では、漸化式計算できる 4 つの直交多項式についても同様な現象が見られかを調べる。

3.1 正規化された Legendre の多項式のゼロ点

Legendre の多項式は、漸化式で次のように表される。

$$P_0(z) = 1, \quad P_1(z) = z, \quad P_{k+1}(z) = \frac{(2k+1)zP_k(z) - kP_{k-1}(z)}{k+1}$$

30 次の Legendre 多項式のグラフの概形は次のようになっている。この図 5 から分かるように、 ± 1 の近辺ではゼロ点が密集し、数値解の精度桁数が得にくい状況になっている。 $P_{30}(z)$ を漸化式計算し、DK 法により数値解を求めてみると表 1 となる (倍精度計算)。各数値解とも計算桁数と同程度の精度を持っている。 $P_{30}(z)$ を (5) 式の方法で計算すると、

第一節で述べた理由により、 ± 1 近辺の数値解の精度は大幅に減少する。ここで X は非精度桁を表す。

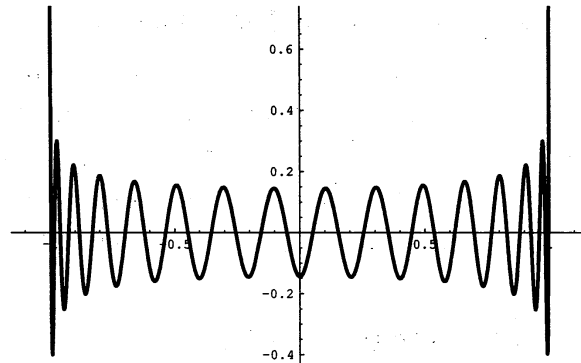


図 5 : 30 次の Legendre の多項式のグラフ

表 1 : 漸化式計算による 30 次 Legendre 多項式のゼロ点

± 0.0514718425553176	± 0.1538699136085835	± 0.2546369261678899
± 0.3527047255308781	± 0.4470337695380892	$\pm 0.5366241481420XXX$
± 0.6205261829892429	± 0.6978504947933157	± 0.7677774321048261
± 0.8295657623827684	$\pm 0.882560535792052X$	± 0.9262000474292743
± 0.9600218649683075	$\pm 0.983668123279747X$	± 0.9968934840746495

ここでも X は、数値解の非精度桁を表す。

3.2 チェビシェフ (Chebyshev) の多項式のゼロ点

n 次の Chebyshev 多項式は漸化式で次のように表される。

$$T_0(z) = 1, \quad T_1(z) = z, \quad T_{k+1} = 2zT_k(z) - T_{k-1}(z)$$

30 次のグラフの概形は次のようになっている。

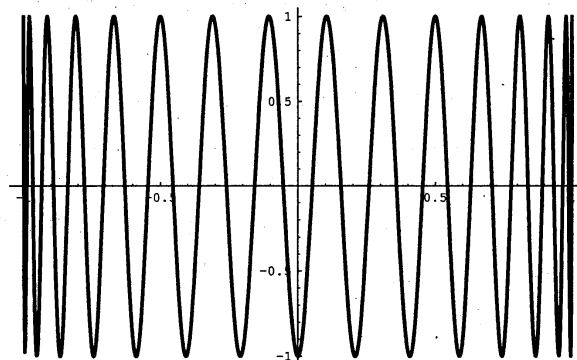


図 6 : 30 次の Chebyshev 多項式のグラフ

この図 6 から分かるように、 $z = \pm 1$ の近辺ではゼロ点が密集し、数値解の精度桁数が得にくい状況になっている。 $T_{30}(z)$ を漸化式計算し、倍精度計算の DK 法により数値解を求めてみると、表 2 になる。各数値解とも計算桁数と同程度の精度を持っている。 $T_{30}(z)$ を (5) 式の方法で計算すると、第一節で述べた理由により、 ± 1 近辺の数値解の精度桁数

は Legendre 多項式の場合と同様大幅に減少する。多項式の次数が増加するにつれて、その傾向が著しくなることは、Legendre 多項式の場合と同じである。

表 2 : Chebyshev 多項式の精度桁数

± 0.0523359562429438	$\pm 0.156434465040230X$	± 0.2588190451025207
$\pm 0.358367949545300X$	$\pm 0.453990499739546X$	$\pm 0.544639035015027X$
$\pm 0.629320391049837X$	$\pm 0.707106781186547X$	$\pm 0.777145961456970X$
$\pm 0.838670567945424X$	$\pm 0.891006524188367X$	± 0.9335804264972017
$\pm 0.96592582628906XX$	$\pm 0.987688340595137X$	± 0.9986295347545738

3.3 エルミート (Hermite) の多項式のゼロ点

n 次の Hermite 多項式は漸化式で次のように表される。

$$H_0(z) = 1, \quad H_1(z) = 2z, \quad H_{k+1} = 2zH_k(z) - 2kH_{k-1}(z)$$

それに $\exp(-z^2/2)$ を乗じた 30 次のグラフの概形は次のようになっている。

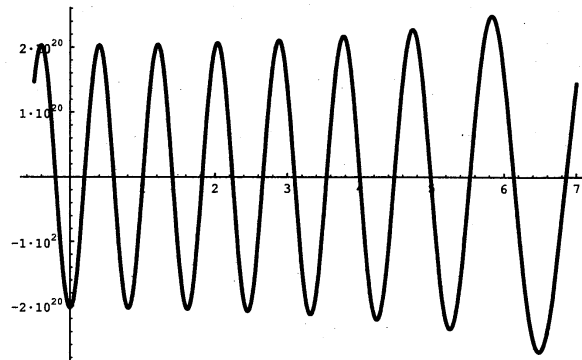


図 7 : 30 次 Hermite 多項式 * $\exp(-z^2/2)$ のグラフ

この図から分かることは、近接解が見られなことである。 $H_{30}(z)$ を倍精度計算の DK 法で求めると次のようになる。

表 3 : $\exp(-z^2/2) \times$ Hermit 多項式の精度桁数

$\pm 0.201128576548871X$	$\pm 0.603921058625552X$	$\pm 1.008338271046723X$
$\pm 1.41552780019818XX$	± 1.8267411436036880	± 2.2433914677615040
$\pm 2.667132124535617X$	$\pm 3.09997052958644XX$	$\pm 3.544443873155349X$
$\pm 4.00390860386122XX$	$\pm 4.483055357092518X$	$\pm 4.98891896858994XX$
$\pm 5.53314715156749XX$	$\pm 6.13827922012393XX$	$\pm 6.86334529352989XX$

どの数値解も計算桁数と同程度の精度桁数となっている。(5) 式で $H_{30}(z)$ を計算した数値結果はこれに比較して、1 桁程度悪くなっている。

3.4 ラゲール (Laguerre) の多項式のゼロ点 ($\alpha = 0$)

n 次の Laguerre 多項式は漸化式で次のように表せる。

$$L_0(z) = 1, \quad L_1(z) = 1 - z, \quad L_{k+1}(z) = -\frac{z - 2k - 1}{k + 1}L_{k-1} - \frac{k^2}{k + 1}L_{k-1}$$

30 次のグラフの概形は次のようになっている。

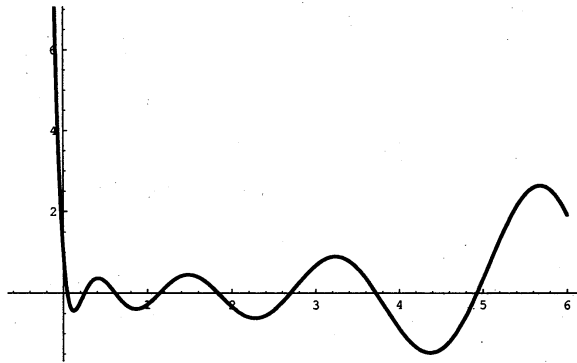


図 8 : 30 次の Laguerre の多項式のグラフ

この図 8 から分かるように、この多項式は近接解を持たないことが分かる。係数の大きさの関係から、20 次のゼロ点を DK 法で求めると次のような結果を得る。この場合は、多項式の計算方法によらず、ほぼ計算桁数と同程度の精度をもつ数値解が得られる。

表 4 : 20 次の Laguerre 多項式のゼロ点

0.070539889691988X	0.372126818001611X	0.9165821024832735
1.70730653102834X	2.749199255309432	4.048925313850886
5.61517497086161X	7.45901745367106X	9.594392869581096
12.0388025469643X	14.81429344263073	17.9488955205193X
21.47878824028501	25.45170279318690	29.93255463170061
35.01343424047900	40.83305705672857	47.6199940473465X
55.8107957500638X	66.52441652561575	

4 考察

多項式を漸化式計算した場合のゼロ点の精度桁数を、4つの直交多項式系について調べてみた。その結果、多項式が近接解を持っていたとしても、多項式を漸化式計算した場合は、計算桁数とほぼ同程度の精度を持つ数値解が得られることが分かった。この多項式の計算方法は、例題 2 で示したような解の原点移動、例題 3 で示したような、解を利用しての計算方法でもない。もちろん、解は自明でもなく、解に適当な変換を施し、新多項式の係数を超高精度計算してもいない。

この現象は、おそらく多くの研究者が気づいていることと思われるが、その論文を不勉強にして著者はまだ見ていない。そこで、この現象の理由の一つについてふれてみる。

z を数値解として、途中の漸化式の大きさと、収束時の多項式の大きさを調べると、数値的に次のような関係が見られる。

表 5 : 途中漸化式の大きさと収束時の多項式の大きさ

	Legendre	Chebyshev	Hermite	Lagerure
途中	$ P_k(z) < 0.99$	$ T_k(z) < 1.00$	$ H_k(z) < 10^{30}$	$ L_k(z) < 10^{30}$
収束時	$ P_{30}(z) \approx 10^{-15}$	$ T_{30}(z) \approx 10^{-17}$	$ H_{30}(z) \approx 10^{15}$	$ L_{20}(z) \approx 10^{17}$

漸化式の計算過程の数値の大きさと、収束時の多項式の大きさを比較すると、ほぼ計算桁数と同じ大きさの桁落ちが見られる。このことは各多項式の計算誤差を評価する反復停

止則が有効に作用していることを示している。例として、Legendre 多項式の場合について、(5)式による通常の多項式計算をした時の収束時の多項式とその導関数の大きさを調べてみる。今仮に $z = 0.99689\dots$ とする。そのとき $P_{30}(z) \approx -3.44 \times 10^{-7}$, $P'_{30}(z) = 1.45 \times 10^{(-1)}$ である。補正項の大きさが -2.4×10^{-6} 程度であるから、 $z = 0.99689\dots$ の精度桁数はせいぜい 6,7 桁と見積もることが出来る。これは、実際の数値結果と一致している。ところで、漸化式計算した場合は表 5 から分かるように、 $P_{30}(z) \approx 10^{-15}$ 、また漸化式計算した P'_{30} は (5) 式で計算した $P'_{30}(z)$ と同じ大きさで見積もれる ($P_{30}(z)$ より精度があるから)。また、この場合の補正項の大きな 10^{-16} 程度となり、結果としてほぼ計算桁数と同程度の精度を持つ数値解が得られていることになる。Chebyshev の多項式の場合も同様である。Hermite と Laguerre の多項式に関しては、近接解がないため、多項式の計算方法に依存した数値解の精度桁数に関する差異は見られなかった。

本研究を進めているとき、著者は近接解の分離について興味深い論文 [4] に出会った。ここでは近接解に対して、十分小さい ϵ に対して区間 $(\alpha - \epsilon, \alpha + \epsilon)$ に属するものを近接解としている。しかしながら ϵ が十分小さくなくても近接解となることや (例題 3)、 $\epsilon = 0$ の場合は、 ϵ が十分小さくとも近接解とはならない、(例えば [4] の中で近接解の例としてあげられている 1×10^{-8} 、 2×10^{-8} 、 3×10^{-8} 等は近接解ではない) こと等には十分な注意が必要であろう。この辺の事情は [7] で詳しく考察されている。

参考文献

- [1] Igarashi M., Relationships between order and efficiency of a class of methods for multiple zeros of polynomials, J.Comp. and Appl. Math., pp.101-113, 1995.
- [2] 小野令美、Durand-Kernar 法と Aberth 法を用いた超高次方程式の数値計算、情報処理学会論文誌、Vol.20, No.5, pp.399-404, 1979.
- [3] 平野管保、浮動小数点演算における代数方程式の数値解法、学位論文、1980.
- [4] 鈴木秀男、小林英恒、一次分数変換を利用した近接根の分離方法とその誤差について、情報処理学会論文誌、Vol.38, No.2, pp.180-191, 1997.
- [5] 山下真一郎、佐竹誠也、高次代数方程式の根の計算限界について、情報処理学会論文誌、Vol.7, No.4, pp.197-201, 1966.
- [6] 山本哲朗、数値解析入門、サイエンス社、東京、1981.
- [7] Wilkinson J.H., Rounding errors in algebraic processes, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1963.