数理解析研究所講究録
第 746 巻 1991 年 182-190

代数方程式の大域的解法と局所的解法の補正項の差異

日本大学農獣医学部　　五十嵐正夫

[1]　はじめに

与えられた代数方程式の数値解を一つずつ求める解法を局所的解法，全部の数値解を同時に求める解法を大域的解法とここでは呼ぶ事にする。良く知られている 2 次や 3 次の大域的解法はほとんどの初期値に対して数値的に収束する事が知られている。そのためそれら解法が大域的収束性（解法が非収束となる出発値の領域の測度がゼロ）を持つのではないかと多くの人が考えたようである。しかし現在までのところ部分的な解答 (SIAM Review,1976) しか与えられていないようである。ここでは局所的解法と大域的解法の補正項を比較し高次大域的解法は必然的に不安定になる要因を含んでいる事を示す。

[2]　記法

与えられた代数方程式を

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

とする。$f^{(k)}(z)$ は $f(z)$ の k階微分を表し，z_k は厳密解α_kに対する近似解とし，z' と z'_k はそれぞれ z と z_kに対する一回反復後の新しい近似解とする。また$\epsilon_k = \alpha_k - z_k$とおき，簡単のため

$$u(z) \equiv \frac{f(z)}{f'(z)} = \frac{f}{f'}, \quad A_k(z) \equiv \frac{f^{(k)}(z)}{k!f'(z)} = \frac{f^{(k)}}{k!f'}, \quad T_m(z_k) \equiv \frac{1}{\sum_{j=1,j\neq k}^{n}(z_k - z_j)^m}$$

の記号を用い混乱のないときは変数を省略することもある。また例えば Newton-Raphson 法 $z' = z - \frac{f(z)}{f'(z)}$において$-\frac{f(z)}{f'(z)}$の項を補正項とよぶ。

[3]　局所的解法の再帰的導出法

$$0 = f(\alpha) = f(z + \alpha - z) = f(z+\epsilon) = f(z) + f'(z)\epsilon + f''(z)\epsilon^2/2! + \ldots + f^{(m)}(z)\epsilon^m/m! + O(\epsilon^{m+1})$$

を

$$u = -A_1\epsilon - A_2\epsilon^2 - \ldots - A_m\epsilon^m - O(\epsilon^{m+1}) = -(\ldots(A_m\epsilon + A_{m-1})\epsilon + \ldots + A_2)\epsilon + A_1)\epsilon - O(\epsilon^{m+1})$$

と書き換える。上の式においてϵのところに次のように各収束次数の補正項を代入する。

(1)　$$u = -(\ldots(A_m h_2 + A_{m-1})h_3 + \ldots + A_2)h_m + A_1)h - O(h'^{m+1})$$

ここで

h_2は2次収束する $Newton - Raphson$ 法の補正項

h_3は3次収束する $Halley$法の補正項

h_4は4次収束する $Kiss$ 法の補正項

....

....

h_mは m 次収束する解法の補正項, $h' = \max_k | h_k |$

とする. $O(h'^{m+1})$ を無視して (1) を h について解くと次のような $m+1$ 次収束する解法の補正項が得られる。

$$h_{m+1} = \frac{-u}{(...(A_m h_2 + A_{m-1})h_3 + ... + A_2)h_m + A_1}.$$

収束次数が6次までの公式を以下に示す。

$$h_2 = -u \quad Newton - Raphson \text{ 法}$$

$$h_3 = \frac{-u}{A_2 h_2 + A_1} \quad Halley\text{法}$$

$$h_4 = \frac{-u}{(A_3 h_2 + A_2)h_3 + A_1} \quad 4\text{ 次の } Kiss \text{ 法}$$

$$h_5 = \frac{-u}{((A_4 h_2 + A_3)h_3 + A_2)h_4 + A_1} \quad 5\text{ 次の } Kiss \text{ 法}$$

$$h_6 = \frac{-u}{(((A_5 h_2 + A_4)h_3 + A_3)h_4 + A_2)h_5 + A_1} 6\text{ 次法}$$

このようにして非常に容易に高次収束する Newton-Raphson 法の König 系と呼ばれる解法が導き出される。このプログラムを表1に示す。そこでは $C(101)$ は方程式の係数で高次項の係数から呼び込む事になっている。ただし $C(1) = 1$ である。また NN は公式の収束次数, Zold は旧近似解, Znew は新近似解である。

[4] **大域的解法の導出法**

$f(z)$ を次のように展開し整理する。

$$f(z) = (z - \alpha_1)(z - \alpha_2)...(z - \alpha_n) = (z - z_1 - \epsilon_1)(z - z_2 - \epsilon_2)...(z - z_n - \epsilon_n)$$

$$= (z - z_1)(z - z_2)...(z - z_n) - (z - z_2)(z - z_3)...(z - z_n)\epsilon_1 + ...$$

$$+(z - z_3)(z - z_4)...(z - z_n)\epsilon_1\epsilon_2 + ... + (-1)^n \epsilon_1\epsilon_2...\epsilon_n$$

ここで

$$g(z) = (z-z_1)(z-z_2)\ldots(z-z_n), \quad \epsilon' = \max_k(|\ \epsilon_k\ |)$$

とおくと

$$f(z) = g(z) + O(\epsilon')$$

をえる。この関係が局所的解法と大域的解法の基本的な差異である。即ち局所的解法における $f'(z), f''(z), \ldots$ の高次項を $g'(z), g''(z), \ldots$ で置き換えれば大域的解法が得られるわけである。その際，$g'(z), g''(z)\ldots$ 等を手際よく求める必要がある。3 次の大域的解法を例にとり示す。

$$\sum_{j=1}^{n} \frac{1}{z-z_j} = \frac{g'(z)}{g(z)}$$

から

$$\sum_{j=1, j\neq k}^{n} \frac{1}{z_k - z_j} = \lim_{z\to z_k}\left(\frac{g'(z)}{g(z)} - \frac{1}{z-z_k}\right) = \frac{g''(z_k)}{2g'(z_k)}$$

を得る。ここで Halley 法の分母における

$$A_2(z_k) = \frac{f''(z_k)}{2f'(z_k)}$$

を

$$\frac{g''(z_k)}{2g'(z_k)} = \sum_{j=1, j\neq k}^{n} \frac{1}{z_k - z_j} \equiv T_1(z_k)$$

で置き換え

$$z_k' = z_k - \frac{u(z_k)}{1 - T_1(z_k)u(z_k)}$$

を得る。一般に $T_m(z_k)$ を手計算で求めるのは大変なので数式処理を用いて以下の式の右辺を計算する。

$$\text{(2)} \qquad T_m(z_k) = \sum_{j=1, j\neq k}^{n} \frac{1}{(z_k - z_j)^m} = \lim_{z\to z_k} \frac{(-1)^{m-1}}{(m-1)!}\left[\left(\frac{g'(z)}{g(z)}\right)^{(m-1)} - \frac{1}{(z-z_k)^m}\right]$$

大域的解法の k次の補正項 H_k は一般に次のように表される。

$$H_2 = \frac{-f}{g}$$

$$H_3 = \frac{-u}{G_1 h_2 + A_1}$$

3

$$H_4 = \frac{-u}{(G_2h_2 + A_2)h_3 + A_1}$$

$$H_5 = \frac{-u}{((G_3h_2 + A_3)h_3 + A_2)h_4 + A_1}$$

$$H_6 = \frac{-u}{(((G_4h_2 + A_4)h_3 + A_3)h_4 + A_2)h_5 + A_1}$$

....

....

ここで G_m は局所的解法における A_m を (2) より導かれる関係式で置き換えたもので 4,5,6 次の補正項を順に陽的に表すと次のようになる。

(3)
$$\frac{-(1 - A_2u)u}{1 - 2A_2u + 0.5(A_2^2 - T_2)u^2}$$

(4)
$$\frac{-(1 - 2A_2u + A_3u^2)u}{1 - 3A_2u + (2A_3 + A_2^2)u^2 - (3A_2^2A_3 - A_2^3 + T_3)u^3/3}$$

(5)
$$\frac{-(1 - 3A_2u + (2A_3 + A_2^2)u^2 - A_4u^3)u}{1 - 4A_2u + (3A_3 + 3A_2^2)u^2 - (2A_2A_3 + 2A_4)u^3 + (A_2^4 - 4A_2^2A_3 + 4A_2A_4 + 2A_3^2 - T_4)u^4/4}$$

[5] **大域的解法の数値的不安定さの原因**

論題を明確にするために局所的解法の導出法とそれに対応する大域的解法の導出法を述べたがそれからも察知できるように，n 個の近似解を同時に与えたときそれらの近似解が同一の厳密解に向かわないような役割を演じる項は T_k である。(3),(4),(5) の式を見れば分かるように，$u(z) = f'(z)/f(z)$ であるから収束の次数が上がるにつれて T_k に乗ぜられる $f(z)$ の次数は上がってくる。例えば 4 次では $f^2(z)$，5 次では $f^3(z)$，6 次では $f^4(z)$ となっている。良く知られているように z が厳密解に近づくにつれ $f(z)$ の値は小さくなるばかりではなくその精度桁も減少する。そのため大域的解法の数値的不安定さの原因は次の 2 に大別できると思われる。

[1] 大域的解法においては収束の次数が上がるにつれて近似解を分離する機能をもつ T_k の役割が相対的に減少する。そのため大域的解法の補正項は局所的解法の補正項と解の近傍で数値的に完全に一致してしまう（条件の良い方程式では）こともある [表 2,3]。それに起因して偽の収束が起こる事もある [表 4]。

[2] 異なる 2 つの近似解が同一の厳密解に向かうような事が起きると T_k の値が不正確（本来とるべき値よりもきわめて大きくなる）になる。それに精度の落ちた $u(z)$ の値が乗

ぜられるため，解の近傍で近似解同士の牽制が起こり近似解の振動現象が起こる事もある [表 4] 。

計算桁数には無関係に，特殊な位置関係にある出発値を取ればいずれの大域的解法であっても数値解が振動し非収束となる例は容易に作れる。又計算桁数に依存するとすれば，いずれの大域的解法も非収束となる測度がゼロでない出発値の領域（原点を中心とする小円）がある事は明かである。何れにしても解に十分接近する前に近似解がうまく分離しなければ，言葉をかえれば十分に良い出発値を選ばないと高次大域的解法は有効でないと言える。図 1 に大域的解法と局所的解法の補正値の大きさと反復回数の関係を示す。

＊注意＊　近似解の分離を良くしようとして多くの A_k を T_{k-1} で置き換えても期待するような結果は得られない。例えば

$$z' = z - \frac{(1 - A_2 u)u}{1 - 2A_2 u + A_3 u^2}$$

において，$A_3(z_k)$ を $0.5(A_2^2 - T_2(z_k))$ で置き換えた上に更に $A_2(z_k)$ を $T_1(z_k)$ で置き換えても良い結果は得られない。

図 1　収束の次数と補正項の大きさの比較

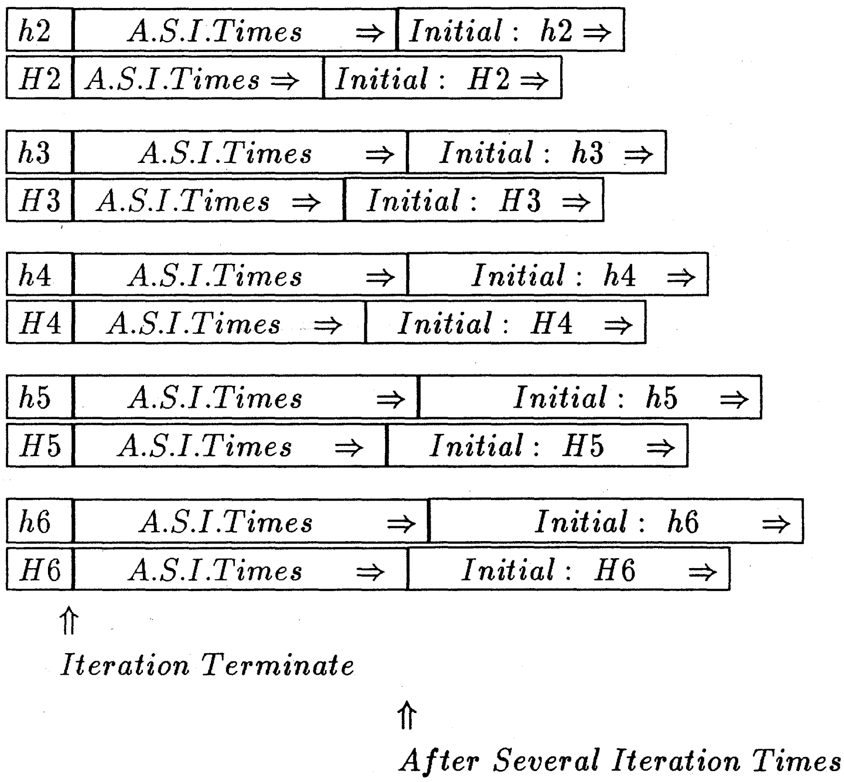

表 1　N 次代数方程式に対する N+1 収束までの Newton-Raphson 系反復解法

```
      SUBROUTINE LOCAL(C,N,NN,Zold,Znew)
      COMPLEX*16 A(101),C(101),F(101),H(101),Zold,Znew,W
      DO 10 I=1,N+1
      F(I)=C(1)
   10 CONTINUE
c   [関数値と任意階数の微分係数/k!の計算]
      DO 20 I=2,N
      F(1)=C(I)+F(1)・Zold
      DO 25 J=2,N+2-I
      IF(J.LE.NN) F(J)=F(J-1)+F(J)・Zold
   25 CONTINUE
   20 CONTINUE
      F(1)=C(N+1)+F(1)・Zold
c   [補助関数 A(I)*k!の計算]
      DO 30 I=1,N
      A(I)=F(I+1)/F(2)
   30 CONTINUE
c   [収束次数が NN の反復式の補正値の計算]
      H(1)=-F(1)/F(2)
      A(1)=(1.0D00,0.0D00)
      DO 40 I=2,NN-1
      W=A(I)
      DO 50 J=2,I
      W=W*H(J-1)+A(I-J+1)
   50 CONTINUE
      H(I)=H(1)/W
   40 CONTINUE
c   [収束次数が NN の反復式での新近似解]
      Znew=Zold+H(NN-1)
```

6

表２　反復回数と補正値の一致桁数の平均（良条件の場合）
２次の大域的解法における近似解を新近似解として

反復回数	2ND	3RD	4TH	5TH	6TH
1	.24	1.02	2.86	1.99	2.34
2	.84	1.32	2.15	2.47	2.51
3	1.47	1.95	2.76	3.09	3.14
4	2.06	2.37	2.93	3.71	3.65
5	2.05	2.37	2.93	3.67	3.63
6	1.88	2.26	2.80	3.39	3.44
7	1.70	2.08	2.56	3.15	3.08
8	1.51	1.80	2.33	2.34	2.68
9	1.16	1.33	1.73	2.07	2.35
10	.74	1.27	1.62	2.10	2.62
11	.80	1.94	3.20	4.37	5.81
12	1.54	3.62	5.68	7.77	9.89
13	2.72	6.43	10.07	12.88	14.30
14	5.15	11.63	15.27	16.00	16.00
15	9.97	16.00	16.00	16.00	16.00
16	15.52	16.00	16.00	16.00	16.00

この例題は２次の大域的解法における近似解を新近似解として用いたものである。２次の大域的解法は１６回の反復で収束しているがその補正項を２次の局所的解法と比較したときまだ完全には一致していない。ところがそれよりも高次の場合は計算桁数内で完全に一致してしまっている。即ち高次の解法になると補正項からみる限り両解法は区別がつかない。

表3　反復回数と補正値の一致桁数の平均（悪条件の場合）

反復回数	2ND	3RD	4TH	5TH	6TH
1	.20	1.11	2.06	1.98	2.80
2	.72	1.32	2.96	2.20	2.64
3	1.50	2.10	2.96	2.98	3.35
4	2.24	2.57	3.23	3.70	3.66
5	2.57	2.87	3.52	4.01	3.96
6	2.87	3.17	3.82	4.31	4.26
7	3.17	3.47	4.11	4.61	4.56
8	3.47	3.77	4.33	4.91	4.85
9	3.76	4.03	4.51	5.21	5.13
.					
.					
.					
36	2.09	2.69	3.85	3.57	4.01
37	1.96	2.56	3.59	3.44	3.88
38	1.82	2.43	3.32	3.30	3.76
39	1.69	2.29	3.05	3.16	3.59
40	1.56	2.16	2.78	3.00	3.30
41	1.43	2.03	2.53	2.81	3.08
42	1.30	1.91	2.37	2.72	3.09
43	1.23	1.83	2.49	2.93	3.50
44	1.21	2.08	3.08	3.92	5.06

この例題も2次の大域的解法における近似解を新近似解として用いたものである。今度は前の例とは異なり両解法の補正項の一致は見られない。この原因は悪条件の方程式であるため反復が停止するとき補正項の大きさが近似解の末位よりかなり大きなためである。経験的には悪条件の方程式にはかえって高次大域的解法が有効であった。その原因がここ，すなわち近似解の精度がでない，にあったわけである。

表 4

4 次の大域的解法における偽収束と数値解の振動

厳密解　$z_k = 2^k + 2^k i, k = 1, 2, 3..., 10.$

I.T.	Real part	Imaginary part
4	.102400000000000D+04	.102400000000000D+04
30	.255999999999988D+03	.255999999999996D+03
30	.255999999999996D+03	.255999999999990D+03
/	.320000012955540D+02	.319999939025938D+02
/	.319999939025899D+02	.320000012955545D+02
/	.159999999977656D+02	.159999999901592D+02
/	.159999999901149D+02	.159999999978043D+02
/	.800006771312966D+01	.800006253876555D+01
/	.800006253876530D+01	.800006771312998D+01
16	.200000000000000D+01	.200000000000000D+01

ここでは $f(z_k)$ の誤差評価を利用しての収束判定を用いた。良く知られているように $f(z_k)$ の誤差評価を完全に行う事は不可能でややその評価は甘くなる。即ち 1bit ぐらいの精度を $f(z_k)$ は持っている場合がある。するとこの例の 256+256i における 2 重解であるかのような，計算桁とほとんど同程度の精度ある偽の近似解が出現する事がある。/のところは近似解がお互いに牽制しあい振動してしまうところである。