数理解析研究所講究録
第 748 巻 1991 年 53-61

多変数非線形方程式の反復解法に対するある数値的停止則

日本大学　農獣医学部　五十嵐正夫

[1] はじめに

多変数の代数方程式や超越方程式のゼロ点を数値的に求めることは，良く知られているように困難な問題である。経験的には十分に良い出発値が与えられないと反復が停止しないばかりか計算のあふれなどが生じ反復を続けること自体が困難となることが多い。そこで反復回数に上限をもうけて，その回数以内にあらかじめ与えた反復停止則を満足しない場合は次々と出発値を替えていくと言う手法が考えられる。その場合，反復によって得られた数値解がすでに収束の状態に向かいつつあるのか，それともとんでも所を徘徊しているのかを知る事ができれば解法の効率は一般には上がると言えよう。

代数方程式

(1) $$f(x) = a_0x^n + a_1x^{n-1} + \ldots + a_{n-1}x + a_n = 0, \qquad f(0) \neq 0$$

の数値解を Newton-Raphson 法，

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

を用いて求める場合次のような停止則が用いられる事が多い。

(a) $|\, x_{k+1} - x_k \,| \leq \epsilon$　:　絶対ϵ 型

(b) $|\, x_{k+1} - x_k \,| \leq \epsilon \cdot |\, x_k \,|$　:　相対ϵ 型

(c) $|\, f(x_k) \,| \leq \epsilon \Sigma_k \,|\, a_k x^{n-k} \,|$　:　$\Sigma - \delta$型（山下[11], *Adams*[1], 五十嵐[8]）

(d) $|\, f(x_k) \,| \leq \epsilon \max_k |\, a_k x^{n-k} \,|$　:　$\max - \delta$型（平野[10]）

ここにおいてϵは単精度計算では 10^{-6}，倍精度計算では 10^{-16}程度とされる事が多い。また上の二つの停止則はϵ型，下の二つの停止則はδ型（伊理[9]）と呼ばれる事が多い。一般に前者は計算桁数内で数値解が反復によってもはや変化しなくなったときに有効に作用し，後者は $f(x_k)$ の精度桁数が喪失したとき有効に作用する。それぞれ特色はある。ϵ型は簡便であるが悪条件の方程式に不安があり，δ型は計算値 $f(x_k)$ の誤差評価が必要であるが悪条件の方程式に対しても有効である。ここで言う悪条件の方程式とは演算桁数と同程度の精度ある数値解が得られない方程式の事である。通常言われている係数の微少な摂動が解に大き

な影響を与える方程式と言う意味ではない。解は係数に対して連続であるとはいえ非線形問題であるから微少な摂動が必ずしも微少な影響を与えるわけではないから，悪条件の方程式はその様に考えるのが自然であると著者は考える。またこれらの停止則の比較検討をMcNamee[6] が行っている。

ここでは悪条件の代数方程式や超越方程式にも適用可能でかつ計算桁数を変えないで計算値 $f(x_k)$ の精度桁数や数値解のおおよその精度を評価できる停止則について考察してみる。この方法は従来我々が一変数の代数方程式に対して提案した方法を多変数の場合に拡張したものである。

[2] 停止則の原理

ここで提案する停止則の原理は次の不等式に基づく[3]。

(2) $$f(0) \neq 0 \text{ なら解の近傍で } \mid f(x) \mid < \mid xf'(x) \mid$$

数値解が $f(x)=0$ の単根に向かいつつあるときは上の不等式は明かである。また数値解が m 重解αに収束しつつある場合は $f(x)=(\alpha-x)^m g(x)$ とし，数値解 x_kがαに十分接近すれば$\alpha \neq 0$ であるから

$$\mid (\alpha-x_k)^m g(x_k) \mid < \mid x_k m(\alpha-x_k)^{(m-1)} g(x_k) + x_k(\alpha-x_k)^m g'(x_k) \mid$$

となることより不等式の成立は明かである。この不等式はそのままゼロを解として持たない超越方程式にもあてはまる。

[3] 一変数代数方程式への適用

この不等式を利用した場合，一変数代数方程式に対して次のような停止則が考えられる。以後 $f(x)$ 等の計算値を $[f(x)]$ と表す事にする。この $f(x)$ の値を次の二通りの方法で計算しそれぞれの値を $A(x)$ と $B(x)$ とおく。

(3) $$A(x)=[f(x)]=[((\dots(a_0x+a_1)x+\dots)x+a_{n-1})x+a_n]$$

一方の $B(x)$ は

$$G(x)=[xf'(x)-f(x)]=[(\dots((n-1)a_0x+(n-2)a_1)x+\dots+a_{n-2})x^2-a_n]$$

$$H(x) = [f'(x)] = [(...(na_0x + (n-1)a_1)x + ... + a_{n-2})x + a_{n-1}]$$

の 2 つの計算値を用いて次のようにして計算する。

(4)
$$B(x) = [f(x)] = [xH(x) - G(x)]$$

有限桁計算において，解の近傍で前に述べた不等式が成立する事により $G(x)$ に含まれる $f(x)$ の情報量よりも $A(x)$ に含まれる $f(x)$ の情報量の方が多いと考えるのが自然である。即ち $f(x)$ に関する情報量は $A(x)$ の方が $B(x)$ よりも多いと言える。そこで $A(x_k)$ の値を基準として $B(x_k)$ を利用して $f(x_k)$ の精度桁数を計る事を考える。$B(x_k)$ の相対誤差は次のようにして評価できる。

$$\frac{|A(x_k) - B(x_k)|}{|A(x_k)|}$$

よって $f(x_k)$ の精度桁数は次式で評価できる。

$$-log_{10}\frac{|A(x_k) - B(x_k)|}{|A(x_k)|}$$

ところで x_k が十分解に接近すると $A(x_k)$ と $B(x_k)$ は誤差ばかりの不安定な値となる事が多いので実際には $f(x_k)$ の精度桁数は次の式で評価する。

(5)
$$l = -log_{10}\frac{|A(x_k) - B(x_k)|}{MIN(|A(x_k)|, |B(x_k)|)}$$

上式右辺の log の中身を $R(x_k)$ と表す事にする。また停止則としては $A(x_k)$ や $B(x_k)$ がゼロの時でも有効に作用するように次の不等式を用いる。

(6)
$$|A(x_k) - B(x_k)| \geq \delta \cdot MIN(|A(x_k)|, |B(x_k)|)$$

ここで δ の値は 0.5 あるいは 0.1 程度に設定する。$\delta = 1$ としない理由は $B(x_k)$ に精度がなくても丸め誤差の影響で $A(x_k)$ と $B(x_k)$ は 1 桁程度一致することがあるためである。

[4] 一変数超越方程式への適用

超越方程式の場合は一般的な記述は不可能なので 3 の具体例を上げ $A(x)$ と $B(x)$ の計算の方法を説明する[4]。

(a) $f(x)$ と $xf'(x)$ が x の一次の項を持つ場合：　$f(x) = exp(x) - ex$

この場合 $A(x) = [exp(x)] - [ex]$, $B(x)$ は次のように計算する。

$$B(x) = [xf'(x)] - [xf'(x) - f(x)] = [xexp(x) - ex] - [xexp(x) - exp(x)]$$

この数値例は 2 重解を持つ場合である．初期値を 2.0 として実際に計算をして見ると反復回数 27 回で次のような数値解が得られる。

$$x(A) = 1.000000020050107 + 0.4440892098500626D - 15i$$

$$x(B) = 1.000000019307109 + 0.5990220625451884D - 15i$$

ここで $x(A)$ は $A(x)$ を $x(B)$ はと $B(x)$ を用いて計算した数値解である。この例は前もってゼロ点の多重度が分からない限りϵ型の停止則が有効に作用しない例でもある。

(b) $f(x)$ と $xf'(x)$ ある項の混合演算が可能な場合　$f(x) = exp(-x^2) - cos(x)$

この場合 $A(x) = [exp(-x^2) - cos(x)]$, $B(x)$ は次のように計算する。

$$B(x) = [x(-2xexp(-x^2) + sin(x))] - [-exp(-x^2)(2x^2+1) + xsin(x) + cos(x)]$$

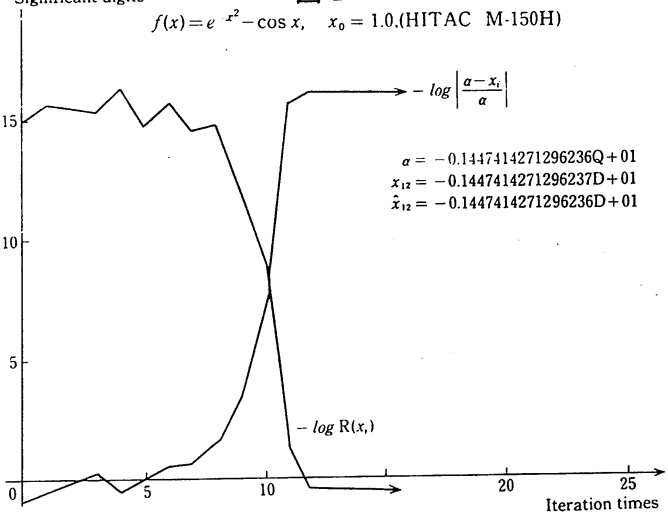
初期値を 1.0 としたとき反復回数 13 回で次のような数値解が得られる。

$$x(A) = -1.447414271296237 - .1387778780781446D - 16i$$

$$x(B) = -1.447414271296236 + .3361026734705064D - 16i$$

上で求めた解は十分孤立しているため計算桁数と同程度の精度ある数値解が求まっている図 1 に数値解の精度桁数の変化と (5) 式による $f(x_k)$ の精度桁数の変化の関係を示す。

図 1



(c) 式の変形によって $f(x)$ と $xf'(x)$ が共通項をもつ例　$f(x)=sin(x)$

この場合 $A(x)$,　$B(x)$ は次のように計算する。

$$A(x)=[sin(x)]$$

$$B(x)=[xcos(x)]-[cos(x/2)(xcos(x/2)-sin(x/2))]+[sin(x/2)(xsin(x/2)+cos(x/2))]$$

初期値を 3.0 とすると 4 回の反復回数で次の数値解を得る。

$$x(A)=3.141592653589793+0.122514845490862000D-15$$

$$x(B)=3.141592653589793+0.000000000000000000D+00$$

ここでの停止則は計算順序の違いによる計算誤差の差異を利用したものとも見なす事ができるから，超越方程式が複雑になればなるほどここで提案する停止則が有効に作用するであろう事は容易に理解できる。

ところで超越方程式のゼロ点の問題を離れて例えば $sin(x)$ の π の近傍での精度桁数の推定に対してもこの方法はかなり有力である。

我々が用いた数値例は以下の通りである。

一変数超越方程式の数値例

1　$f(x)=exp(x)-ex$

2　$f(x)=exp(-x^2)-cos(x)$

3　$f(x)=sin(x)$　　4　$f(x)=cos(x)$

5　$f(x)=tan(x)$　　6　$f(x)=sinh(x)$

7　$f(x)=cosh(x)$　　8　$f(x)=tanh(x)$

9　$f(x)=cos(x)-0.001$

10　$f(x)=exp(x)-0.5x^2-x-1$

11　$f(x)=(xsin(x)-1)^2$

12　$f(x)=(exp(-x^2)-cos(x))^2$

13　$f(x)=sin(x)-x+2\pi$

14　$f(x)=g(x)g(x)-0.5\,\omega\times cosh(xh)-cos(\pi\ h)$

　$g(x)=cosh(0.5x-xh)/cosh(0.5x)$,　$h=0.05,0.02$，$\omega=1.5,1.6,1.8,1.9$

[3]　二変数の方程式の場合[5]

与えられた方程式を $f(x,y)=0$, $g(x,y)=0$ その Jacobi 行列を $J(x,y)=f_x g_y - g_x f_y$ とおく。簡単のため点 $(x,y)=(x_k,y_k)$ での計算値を $[J(f,g)]_k$ 等略記することにする。二変数の場合には次のような形式で反復を行う事にする。

$$x_{k+1}=x_k-\left[\frac{fg_y-gf_y}{J(f,g)}\right]_k=\left[\frac{g_y(xf_x-f)+f_k(g-xg_x)}{J(f,g)}\right]_k=\left[\frac{G(x,k)}{J(f,g)}\right]_k \tag{7}$$

$$y_{k+1}=y_k-\left[\frac{gf_x-fg_x}{J(f,g)}\right]_k=\left[\frac{f_x(yg_y-g)+g_x(f-yf_y)}{J(f,g)}\right]_k=\left[\frac{G(y,k)}{J(f,g)}\right]_k \tag{8}$$

また一変数の場合に対応する $A(x,y)$ と $B(x,y)$ は次のようにして計算する。

$$A(x,k)=[fg_y-gf_y]_k,\quad B(x,k)=[xJ(f,g)]_k-[G(x,k)]_k \tag{9}$$

$$A(y,k)=[gf_x-fg_x]_k,\quad B(y,k)=[yJ(f,g)]_k-[G(y,k)]_k \tag{10}$$

一変数の場合と同様にして

$[fg_y-gf_y]_k$ に関する情報量は $B(x,k)$ より $A(x,k)$

$[gf_x-fg_x]_k$ に関する情報量は $B(y,k)$ より $A(y,k)$

の方が多いといえるから次の 2 つの不等式を満たしたとき反復を停止則する。

$$|A(x,k)-B(x,k)|\geq \delta\cdot MIN(|A(x,k)|,|B(x,k)|)$$

$$|A(y,k)-B(y,k)|\geq \delta\cdot MIN(|A(y,k)|,|B(y,k)|)$$

ただし　代数方程式 : $\delta=0.1$，　超越方程式 : $\delta=0.01$

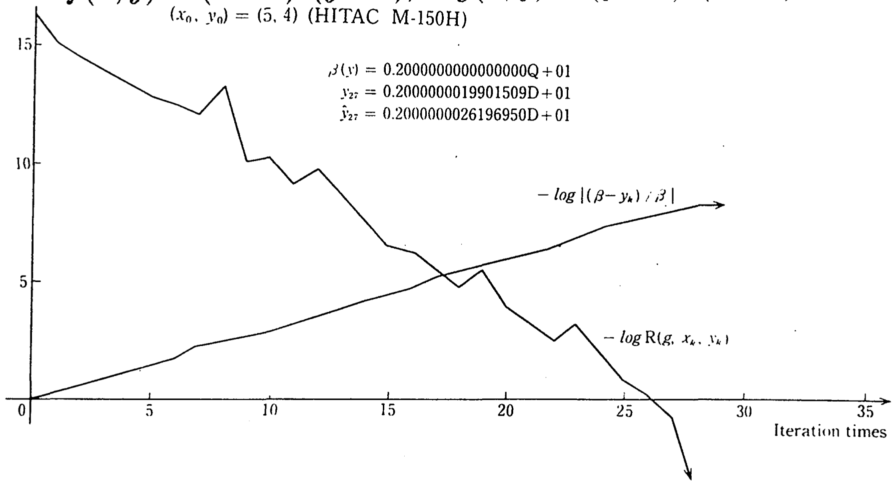
図 2 に $f(x_k,y_k)$ と $g(x_k,y_k)$ の精度桁数と数値解の精度桁数の変化の様子のグラフを示す。ここで $R(f,x_k,y_k)$，$R(g,x_k,y_k)$ はそれぞれ

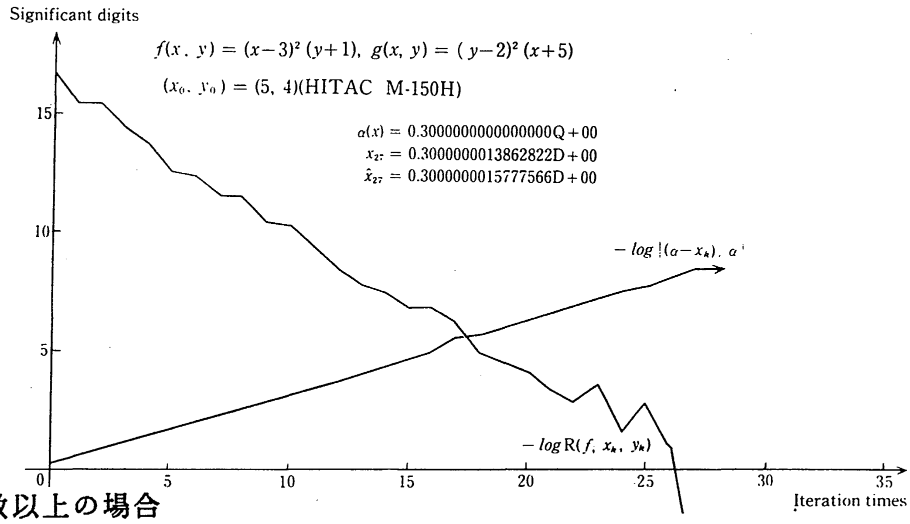
$$R(f,x_k,y_k)=\frac{|A(x,k)-B(x,k)}{MIN(|A(x,k)|,|B(x,k)|)},$$

$$R(g,x_k,y_k)=\frac{|A(y,k)-B(y,k)}{MIN(|A(y,k)|,|B(y,k)|)}$$

である。

図 2　$f(x,y)=(x-3)^2(y+1),\quad g(x,y)=(y-2)^2(x+5)$ の数値例





[4]　三変数以上の場合

方程式を $f_t(x_1,x_2,...,x_n)=0,\quad t=1,2,...,n$ とし，x_kを数値解とする。$A_t=[f_t(...,x_k,...)]$ この場合　$f_t(...,x_k,...)$ の今一つの値は

$$B_t=\left[x_t\frac{\partial f_t}{\partial x_t}\right]-\left[x_t\frac{\partial f_t}{\partial x_t}-f_t\right]$$

で求める事にする。ここでもし$\partial f_t/\partial x_t=0$ ならばゼロとならない別の$\partial f_p/\partial x_p$ を用いる事にする。前と同じ理由で数値解が解に十分接近すると $|\,x_t\frac{\partial f_t}{\partial x_t}\,|>|\,f_t\,|,\ t=1,2,...n$ だから次のような停止則を用いる。

(11)　　$|\,A_t-B_t\,|>\delta(t)\cdot MIN(|\,A_t\,|,|\,B_t\,|)$，　$\delta(t)=0.01,\ t=1,2,...,n$

我々が用いた数値例を以下に示す。

高次非線形方程式の数値例

1	$f(x,y) = exp(x) + xy - 1 \qquad g(x,y) = sin(xy) + x + y - 1$
2	$f(x,y) = x^2 + xy^3 - 9 \qquad g(x,y) = 3xy^2 - y^3 - 4$
3	$f(x,y) = exp(-x)sin(x) - y \qquad g(x,y) = exp(-x) - y$
4	$f(x,y) = (x-3)^2(y+10) \qquad g(x,y) = (y-2)^2(x+5)$
5	$f(x,y) = [exp(sin(x)) - y]log(y) \qquad g(x,y) = (y-1)^2(x - 3\ \pi\ )$
6	$f(x,y) = 2x - y^2 + log(x) \qquad g(x,y) = x^2 - xy - x + 1$
7	$f_1(X) = x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 + 4.0100$
	$f_2(X) = x_1x_1 - 2x_2x_3 + x_4x_4 - 40.1392$
	$f_3(X) = x_2x_2 - 2x_3x_4 + x_5x_5 - 47.2092$
	$f_4(X) = x_3x_3 - 2x_4x_5 + x_1x_1 - 16.4904$
	$f_5(X) = x_4x_4 - 2x_5x_1 + x_2x_2 - 38.1040$
8	$f_1(X) = sin(x_1) + +cos(x_2) + exp(-x_3) - 0.475111217$
	$f_2(X) = sin(x_2) + +cos(x_3) + exp(-x_4) - 0.062379431$
	$f_3(X) = sin(x_3) + +cos(x_4) + exp(-x_5) - 0.505785666$
	$f_4(X) = sin(x_4) + +cos(x_5) + exp(-x_6) - 0.470661558$
	$f_5(X) = sin(x_5) + +cos(x_6) + exp(-x_7) - 0.002157893$
	$f_6(X) = sin(x_6) + +cos(x_7) + exp(-x_8) - 0.474822218$
	$f_7(X) = sin(x_7) + +cos(x_8) + exp(-x_9) - 0.511609975$
	$f_8(X) = sin(x_8) + +cos(x_9) + exp(-x_1) - 0.446107427$
	$f_9(X) = sin(x_9) + +cos(x_1) + exp(-x_2) - 1.087756076$

[5] おわりに

ここでは悪条件の超越方程式にも適用可能なある種の反復停止則を提案した。従来悪条件の超越方程式にも適用可能な停止則はなかったようである。例えば悪条件の方程式に対してϵ型の停止則において機械的に $\epsilon = 10^{-16}$(倍精度計算) とすると反復は停止しない事が多い。また超越方程式に対して代数方程式に対するようなδ型を適用するには関数を展開する必要が生じ現実的には無理である。

代数方程式の数値的求解問題にせよ超越方程式の数値的求解問題にせよ，多変数場合の困難さは一変数に比べて比較にならない。経験的には現状の”点”によるゼロ点の探査の方法

をとる限りその困難さの克服は無理と思われる。何らかの"直線的"ゼロ点の探査方法の開発，即ち与えられた方程式系の関数値の値が少なくとも同時に減少するような新数値解tの探査法が必要である。

文献

[1] D.A.Adams,"A stopping criterion for polynomial root finding", Technical Report No.CS 55.,pp.1-11,1967.

[2] M.Igarashi,"Zeros of polynomial and an estimation of its accuracy", J. of Information Processing, Vol.5. No.3, pp.172-175, 1982.

[3] M.Igarashi,"A termination criterion for iterative methods used to find the zeros of polynomials", Math. Comp.,Vol.42, No.165 pp.165-171,1984.

[4] M.Igarashi,"Practical stopping rule for finding roots of nonlinear equations", J.Comput.Appl.Math.,Vol.12 and 13,pp.371-380,1985.

[5] M.Igarashi,"Practical problems arising for finding roots of nonlinear equations", Appl.Numer.Math., Vol.1, No.5, pp.433-455,1985.

[6] J.M.McNamee,"A comparison of methods for terminating polynomial iterations" J.Comput.Appl.Math.,Vol.21 pp.239-244,1988.

[7] L.R.Rall,"Convergence of the Newton process to multiple solutions", Numer. Math.,Vol.9, pp.23-37, 1966.

[8] 五十嵐正夫，"ニュートン法のある停止則"，コンピュートロール，戸川隼人編集,，Vol.12, pp.131-135,1985.

[9] 伊理正夫　"ニュートン法の実際"，　数理科学,8 月,PP.10-16,1981

[10] 平野菅保，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.

[11] 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，Vol.7, No.4, pp.197-201, 1966.