

Newton-Raphson 系反復式の大域的性質と局所的性質

日本大学農獣医学部 五十嵐正夫 (Masao IGARASHI)

§1 はじめに

今から10年以上も前、代数方程式の多重解と収束にいたるまでの反復回数について伊理正夫先生が次のような事を書かれていた^[2]。

「平野菅保先生から経験則として教えて頂いたことにニュートン法をつかって多項式 $|f(z_k)|$ (z_k は数値解) の値が誤差のみとなるまでの反復回数は何重解であってもほぼ一定である。」

この事を、伊理正夫先生は次のように解析しておられた。

n 次の多項式 $f(z)$ を

$$(1) \quad f(z) = (z - \alpha)^m g(z)$$

とおき、それに Newton 法

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

を適用する。もし $|z_k - \alpha|$ が十分小さければ反復式 (1) で定められる z_{k+1} は

$$z_{k+1} = z_k - \frac{(z_k - \alpha)^m g(z_k)}{m(z_k - \alpha)^{m-1} g(z_k) + (z_k - \alpha)^m g'(z_k)} \approx z_k - \frac{z_k - \alpha}{m}$$

より次の関係式を満たす。

$$(3) \quad |z_{k+1} - \alpha| \approx \left(1 - \frac{1}{m}\right) |z_k - \alpha|$$

この (3) 式より、 z_k は縮小率 $1 - 1/m$ で α に接近、即ち 1 次収束する事が分かる。そこで関数値 $f(z)$ の計算における誤差の一つの上界を δ とすると、

$$(4) \quad |z - \alpha| < (\delta/g(\alpha))^{1/m}$$

と評価できる。 $g(\alpha)$ が普通の大きさとすれば解 α から $\delta^{1/m}$ 離れた z はすべて数値的な解とみなす事ができる。例えば、 $\delta = 10^{-s}$ なら $|z - \alpha| < 10^{-s/m}$ 、則ち、 s 桁計算しても、 m 重解の精度は s/m 桁しか得られない。

さらに、当面の z_k が何重解の数値解であっても、 $f(z_k)$ が誤差のみとなるまでの反復回数はほぼ一定であると言う事は次のようにして示される。

$z = z_k$ とおいて、(1) 式を (3) 式に代入し、 $g(z_k) \approx g(\alpha)$ とおくと

$$(5) \quad |f(z_{k+1})| \approx \left(1 - \frac{1}{m}\right)^m |f(z_k)|$$

となる。ここで $\left(1 - \frac{1}{m}\right)^m$ は $m = 2, 3, 4, 6, \dots$ に対して 0.250, 0.296, 0.316, 0.328, 0.335, ... と単調に増大して e^{-1} に近づく。したがって、(5) 式は多重解の場合は、一反復あたりの関数値の絶対値の縮小率は多重度に関係なくほぼ一定である、と読む事ができる。

だいぶ引用が長くなったが、要約すと次の2点になると思われる。

(A) m 重解の精度桁数限界は計算桁数の $1/m$ 桁。

(B) 何重解の数値解であっても、関数値が誤差のみとなるまでの反復回数はほぼ一定。

伊理先生も紹介なさっているように、同様な事を平野先生から聞かされていた筆者は上の事実にひどく興味を持ったものでした。そこでもう少し別な視点から (A) と (B) を考えてみようとしたのがこの小論である。(A) と (B) をいまま少し詳しく検討してみると次のような問題点がある事がわかる。

(A) は多重解の近辺に別な解、一般に近接解と呼ばれる、があった場合はどうなるのか。即ち、 $g(\alpha)$ が普通の大きさにない場合の数値解の精度桁数はどうなるのかと言う問題である。

(B) に関しては、経験的には解の多重度によって、収束するまでの反復回数が異なる。例えば2重解と3重解を比べると3重解の方が反復回数が多い。その事と(5)式との関連はどうなるのかと言う問題である。

そこでここでは、多重解や数値解の精度桁数限界や、それが収束するまでの具体的な反復回数を考察してみる。

§2 収束開始以前と以後

数値解が収束するまでの反復回数の評価は収束が始まる以前と以後にわけて考察することが合理的である。と言うのは収束の開始前後において、収束の早さが大き

く異なるからである。開始前は1次収束であり、開始後は2次収束（孤立単解の場合）と一般になるからである。具体的には、収束が始まる以前とは $f(z_k)$ の精度桁数と計算桁数がほぼ同じ事を意味し、収束が始まった以降とは $f(z_k)$ の精度桁数が計算桁数より少ない事を意味する。

n 次代数方程式に対して、初期値を大きめに取った場合、収束が始まる以前の数値解の減少率は2次収束する Newton-Raphson 法の場合、 $1 - 1/n$ で評価する事ができる^[1]。これは多重解の数値解でも、孤立解の数値解でも同じである。

収束が始まると、一反復あたりの数値解の精度桁数は、解の多重度や近接する解があるかないかに依存して増加する。良く知られているように、孤立解であれば精度桁数は2倍ずつ増加する。近接する解を持たない m 重解であれば、(3)式に従い数値解の精度桁数は徐々に増加する事になる。この事を $f(z_k)$ の精度桁数から見ると次の事が言える。

命題1 $f(z) = (z - \alpha)g(z)$ において α の数値解 z_k の精度桁数限界は次のようになる^[4]。

$$(6) \quad \text{計算桁数} - (g(z_k) \text{ の非精度桁数})$$

このように考えると、形式的ではあるが、非常に簡単に数値解の精度限界が示される。例えば孤立 m 重解であれば、数値解の精度が計算桁数/ m となったとき $f(z_k)$ の精度桁数は喪失するから m 重解の精度桁限界は計算桁数の $1/m$ となる。またもし m 重解の近傍に別な解があれば、それによる桁落ち分を差し引いた残りの桁数の $1/m$ が精度桁数限界となる。

数値例でこの事を考えてみる。

数値例 1

$$f(z) = (z - 1.2300)(z - 1.2300)(z - 1.2300) = (z - 1.2300)g(z)$$

この例題は、純粋な3重解を持つから計算桁数の $1/3$ 桁の精度しか持つ事はできない。 $g(z)$ の計算における桁落ち数はその前の項の $(z - 1.2300)$ の桁落ち数の2倍になる。

次に $f(z)$ を次のように変化させてみる。

数値例 2

$$f(z) = (z - 1.2355)(z - 1.2366)(z - 1.2377) = (z - 1.2355)g(z)$$

このようにすると、数値解が 1.23... となるまでは 3 重解のような振る舞いをし、その後は単解のごとく振る舞うことになる。いま 1.2355... なる数値解が得られたとすると、 $g(1.2355...)$ での桁落ち数は 6 桁となるから、得られた数値解の 1.2355... の下 6 桁は信用できない数値となる。次に $f(z)$ を次のように変化させてみる。

数値例 3

$$f(z) = (z - 1.2355)(z - 1.2355)(z - 1.2377) = (z - 1.2355)g(z)$$

1.2355 は 2 重解で近接解 1.2377 を持つ。1.2355... に数値解が収束したとすると、 $g(1.2355...)$ において、 $1.2377 - 1.2355...$ で 3 桁の桁落ち、 $1.2355 - 1.2355...$ では前の項と同じ桁落ちが起きるから、精度桁数は $(\text{計算桁数} - 3)/2$ となる。

以上簡単な数値例で命題 1 の意味を説明した。いずれにしても $f(z)$ の値を計算しながら反復を重ねていく方法においては、数値解の多重度や近接解を持つか否かによって数値解の精度桁数限界は異なり、計算桁数と同程度の精度桁数は一般には望めない。もっと極端な言い方をすれば、多重解の数値解に対して、計算桁数と同程度の精度桁数の得られる解法は存在しない、といえる。

上の数値例の数値結果 (PC9801 FA, 倍精度計算)

数値例 1	1.230009381536695	1.229989963687839	1.230000361637565
数値例 2	1.237699999958862	1.235500000037976	1.236599999765039
数値例 3	1.237700000138168	1.235499523405081	1.235500143784612

§3 m 重解と反復回数

Newton-Raphson 系の反復式を用いた場合、収束するまでの反復回数を決める要因には次のようなものがある。

- [1] 反復式の収束次数
- [2] 初期値
- [3] 計算桁数

[4] 反復停止則

反復回数は [2], [3] や [4] と密接な関連があるにもかかわらず、あまり考察対象とはされてこなかったようである。例えば、初期値が解から遠く離れていれば、収束が始まるまでは 1 次収束であるから、そこに到達するまではかなりの反復回数を要するわけである。前に述べた事をもっと一般的に言えば、 n 次代数方程式に対して、 k 次収束の反復式を適用した場合、収束が始まるまでの数値解の減少率は

$$(7) \quad \left(1 - \frac{k-1}{n+k-2}\right)$$

と評価できる^[1]。この事より、収束次数の異なる 2 つの解法、 p 次収束と q 次収束、に対して同一の初期値をあたえて、収束開始までの反復回数がそれぞれ p' 回と q' 回であったとすると、

$$\left(1 - \frac{p-1}{n+p-2}\right)^{p'} \approx \left(1 - \frac{q-1}{n+q-2}\right)^{q'}$$

より次の関係が成立する。

$$(8) \quad q' = p' \frac{\log(1 - (p-1)/(n+p-2))}{\log(1 - (q-1)/(n+q-2))}$$

いったん収束が始まってしまうと、収束するまでの反復回数は数値解の種類、計算桁数と収束次数によって決まる。具体的に言えば孤立解、10 進 16 桁計算、2 次収束の解法であれば 1, 2, 4, 8, 16 と数値解の精度桁数は増加する。だから倍精度計算であれば、4 回の反復で収束する事になる。つまり $f(z_k)$ の精度桁数が喪失する事になる。

次に孤立 2 重解の数値解が、収束開始から収束するまでの反復回数について考えてみる。説明を分かりやすくするため、計算桁数は 2 進 24 ビットとする。孤立 2 重解であるから数値解の精度桁数限界は計算桁数の 1/2、つまり 12 ビットとなる。厳密解を α とし、 z_k から収束を開始し、 z_{k+l} で反復停止則が作用したとする。すると $z_k - \alpha$ からみて $z_{k+l} - \alpha$ は 12 ビット桁落ちをしているから次の式が成立する。

$$(9) \quad \frac{z_k - \alpha}{z_{k+l} - \alpha} \approx 2^{12}$$

ここで (3) 式より

$$(10) \quad |z_{k+l} - \alpha| \approx \left(\frac{1}{2}\right)^l |z_k - \alpha|$$

であるから (9) 式に (10) 式を代入すると $l \approx 12$ となる。このことより単精度計算では 2 重解は反復開始後、12 回で収束するといえる。

同様に考えると、 t 進 s 桁計算、孤立 m 重解の場合、収束開始後の反復回数 l は

$$t^{-s/m} \approx \frac{|z_{k+l} - \alpha|}{|z_k - \alpha|} \approx \left(1 - \frac{1}{m}\right)^l$$

より

$$(11) \quad l \approx -\frac{s \log_e t}{\log_e \left(1 - \frac{1}{m}\right)} \approx s \log_e t$$

となる。 m を大きくすると分母は -1 に近づくから、10 進 16 桁の倍精度計算では、何重解であっても $16 \log_e 10 \approx 37$ 回程度の反復で収束する事になる。

§ 4 おわりに

数値解の精度限界をここでのように $f(z)$ の非精度桁数で説明すると、ウイルキンソン^[3]の提示した有名な例題

$$f(z) = (z-1)(z-2)(z-3)(z-4)\dots(z-16)(z-17)(z-18)(z-19)(z-20)$$

の数値解の精度がでにくい事が簡単に理解できる。

例えば $f(z) = (z-16)g(z)$ とすればわかるように、10 代の数値解の精度はでにくい。この例題を係数の摂動に敏感と言う意味で悪条件の方程式と理解するか、近接解を持つからと言う意味で悪条件の方程式とみるか、立場は分かれると思うが、係数に摂動を与えなくても数値解の精度がでない例題であると言う事に注意を向ける必要がある。

ところで収束の次数が上がれば、反復回数が少なくなるから、 $f(z_k)$ の誤差上界を評価する回数が減少する。また計算桁数が増加すればするほど高次解法が有利になる。むろん、その分だけ高次導関数を計算する必要があるが、その計算手間は高

次になればなるほど相対的に少なくなる。これらの事を考慮すると、従来言われてきた3次代数方程式までは2次収束するNewton-Raphson法が良く、それ以上は3次収束するHalley法が良いと言った事は必ずしも言えなくなる[5],[6]。経験的には n 次代数方程式には $n/2$ 次収束ぐらいの解法がもっとも効率的のようである。

REFERENCES

1. 五十嵐正夫, *Newton-Raphson* 系解法の収束の次数と反復回数との関係, 情報処理学会論文誌 **32** (1991), 1349-1353.
2. 伊理正夫, ニュートン法の実際, 数理科学 **8** (1981), 10-16.
3. J.H. ウイルキンソン著 (一松, 四条訳), 丸め誤差解析, 培風館, 1969.
4. M. Igarashi, *Practical problems arising for finding roots of nonlinear equations*, Applied Numerical Math. **1** (1985), 433-455.
5. L. Collatz, *Functional analysis and numerical mathematics*, Academic Press, New York, 1966.
6. T. Pomentale, *A class of iterative methods for holomorphic functions*, Numer. Math. **18** (1971), 193-203.