

代数方程式に対する Durand-Kerner 法の初期値の改良†

中田多美†† 川本則行††† 名取亮††

本論文の目的は、DK 法における一般的な初期値の改善を行うことである。DK 法は代数方程式の全根を同時に求める解法で大域的収束性をもつことが知られているが、初期値が根と離れていると収束が遅くなる。一般には Aberth の初期値が用いられているが、全根を内に含んだ十分に大きい円周上に初期値をとるため、効率のよい初期値とはいえない。そこでこれに代わる一般性をもった初期値を考え、有効性を比較・検討した。方法 1 は全根を内に含んだ十分に小さい円の半径を求めその円周上に初期値をとる方法であり、Aberth の初期値より根に近いだけ速い収束が期待される。方法 2 は各根との距離の 2 乗の総和が最小となる半径を求めその円周上に初期値をとる方法であり、根の分布によらず速く収束することが期待される。数値例として Chebyshev の数値積分公式の分点を根にもつ方程式 (5~80 次, 5 次きざみ) と、 $z = x + iy$ ($-10 \leq x, y \leq 10$, 一様乱数) を根にもつ方程式 (15, 30, 50, 80 次, 各 20 組) に対し、各初期値を用いて DK 法を適用した結果、(1) 半径の見積りが大きいと収束は遅い、(2) 高次になるほど方法 2、方法 1、Aberth の順に優劣がはっきりする、(3) 方法 2 は根の分布によらず収束が速い、という結果が得られた。したがって DK 法は根に近い初期値を選ぶことが望ましく、特に方法 2 による初期値が最も有効であるといえる。

1. はじめに

代数方程式 $P_n(z) = 0$ ただし

$$P_n(z) = a_0 z^n + a_1 z^{n-1} + \dots + a_{n-1} z + a_n \quad (a_0 \neq 0) \quad (1)$$

の全根を同時に求める解法の 1 つ、Durand-Kerner の 3 次法 (以下、略して DK 法) は、反復公式

$$\begin{cases} z_i^{(r+1)} = z_i^{(r)} + \psi_i(z_1^{(r)}, \dots, z_n^{(r)}) \\ \psi_i(z_1, \dots, z_n) = \frac{P_n(z_i)/P'_n(z_i)}{1 - \frac{P_n(z_i)}{P'_n(z_i)} \sum_{\substack{j=1, \dots, n \\ j \neq i}} \frac{1}{z_i - z_j}} \end{cases}$$

により根を求める方法であり、

- a) 全根をほぼ同じ精度で求められる。
- b) 減次操作を必要としないので、入力した係数の精度が保たれる¹⁾。
- c) 大域的収束性がある²⁾。
- d) 得られた根の誤差評価を Smith の方法により厳密に行うことができる。

という利点がある。

DK 法の初期値として一般的に知られている Aberth の初期値は、以下のようにして求める³⁾。

n 次方程式 $P_n(z) = 0$ の n 個の根 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ の複素平面上での重心

$$\beta = \frac{\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n}{n} = -\frac{a_1}{na_0}$$

を中心とし、全根を内部に含む円の半径 r を求め、その円周上に等間隔に採った点を初期値とする。

半径 r の見積りは、次のようにする。

$z = \xi + \beta$ とおき、 $P_n(z)$ を ξ の式

$$\begin{aligned} \tilde{P}_n(\xi) &= P_n(\xi + \beta) \\ &= c_0 \xi^n + c_1 \xi^{n-1} + \dots + c_{n-1} \xi + c_n \end{aligned}$$

に変換し、さらに

$$\tilde{q}_n(x) = |c_0| x^n - |c_1| x^{n-1} - \dots - |c_{n-1}| x - |c_n|$$

を作る。 $\tilde{q}_n(x)$ は、 $x > 0$ の範囲に唯一の根 r (実数) をもち、 $\tilde{P}_n(\xi)$ の任意の根 ξ の絶対値は r を越えないことがわかっている。また

$$r \leq r^* = \max_{k=1, \dots, n} (m |c_k/c_0|)^{1/k}$$

($m: c_1, \dots, c_n$ の中で 0 でないものの個数)

より、 r の近似値 R_0 は、 r^* と 0 の初期値とした $\tilde{q}_n(x) = 0$ に対する二分法により求まる。

この R_0 を用いて

$$z_i^{(0)} = \beta + R_0 \exp \left[i \left(\frac{2\pi(i-1)}{n} + \frac{3}{2n} \right) \right] \quad (i = 1, \dots, n) \quad (2)$$

により初期値を求める。

Aberth の初期値は、方程式が高次になるにつれて半径の見積りが大きくなりすぎる傾向がある。Chebyshev の数値積分公式の分点を根としてもつ方程式 (第 3 章参照) の場合には図 1 のようになる。

一方 DK 法は、初期値が根と離れていると反復回数は多くなる¹⁾。そこで Aberth の方法に代わる一般性をもった初期値を考え、DK 法の収束効率を高め

† Better Initial Values in the Durand-Kerner Method for Solving Algebraic Equations by TAMI NAKATA (Institute of Information Sciences and Electronics, University of Tsukuba), NORIYUKI KAWAMOTO (Nihon Digital Equipment Corporation) and MAKOTO NATORI (Institute of Information Sciences and Electronics, University of Tsukuba).

†† 筑波大学電子・情報工学系
††† 日本 DEC

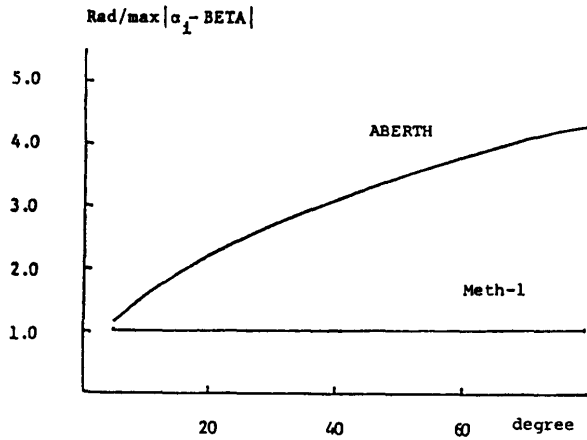


図 1 方程式の次数と初期値の半径との関係
 Rad : Aberth, または方法 1 の半径
 α_i : 各根
 BETA: 根の重心

Fig. 1 Relation between the degree of equation and the radius of initial values.
 Rad : The radius of Aberth or Method-1
 α_i : each root
 BETA: The center of gravity of the roots.

る工夫を行った。

2. 初期値の改良

Aberth の初期値に代わる新しい初期値を求めるために、全根を内に含むなるべく小さな円の半径を用いる方法 (方法 1) と、各根からの距離の二乗の総和が最小となるような半径を用いる方法 (方法 2) を考える。

初めに、これから使用する定理を述べる。

定理 (単位円内外のゼロ点の個数を求める定理)³⁾
 n 次多項式

$$\varphi(z) = a_0 z^n + a_1 z^{n-1} + \dots + a_{n-1} z + a_n \quad (a_0 \neq 0)$$

から出発して、 $\varphi_0(z) = \varphi(z)$ とおき、多項式の列

$$\varphi_l(z) = a_0^{(l)} z^{n_l} + a_1^{(l)} z^{n_l-1} + \dots + a_{n_l-1}^{(l)} z + a_{n_l}^{(l)} \quad (a_0^{(l)} \neq 0)$$

を

i) $|a_0^{(l)}| < |a_{n_l}^{(l)}|$ のときには、

$$\varphi_{l+1}(z) = \varphi_l(z) - \frac{a_0^{(l)}}{a_{n_l}^{(l)}} \varphi_l(z) \quad (3)$$

ii) $|a_0^{(l)}| > |a_{n_l}^{(l)}|$ のときには、

$$\tilde{\varphi}_{l+1}(z) = \tilde{\varphi}_l(z) - \frac{a_{n_l}^{(l)}}{a_0^{(l)}} \varphi_l(z) \quad (4)$$

により定義する ($l=1, 2, \dots$)。

注) ii) においては、 $\varphi_{i+1} = \tilde{\varphi}_{i+1}$ により求める。

また、

$$\tilde{\varphi}_l(z) = \overline{a_{n_l}^{(l)}} z^{n_l} + \overline{a_{n_l-1}^{(l)}} z^{n_l-1} + \dots + \overline{a_1^{(l)}} z + \overline{a_0^{(l)}}$$

$\varphi(z)$ が単位円周上にゼロ点をもたず、かつ、 $n_l=0$ にならない間は、

どの l に対しても $|a_0^{(l)}| = |a_{n_l}^{(l)}|$ とならない

ならば、次々と $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ が定義できて、ある $m (\leq n)$ に対して、

$$\varphi_m(z) = \text{定数} \neq 0 \quad (n_m = 0)$$

となり、 $\varphi(z)$ の単位円内のゼロ点の個数 N_- 、単位円外のゼロ点の個数 N_+ は、

$$\begin{cases} N_- = \sum_{l: |a_0^{(l)}| > |a_{n_l}^{(l)}|} (n_l - n_{l+1}) \\ N_+ = \sum_{l: |a_0^{(l)}| < |a_{n_l}^{(l)}|} (n_l - n_{l+1}) \end{cases}$$

で与えられる。

これより、多項式 $\varphi(z)$ のゼロ点がすべて単位円内にあるための必要十分条件は、 $\varphi_0 = \varphi$ から出発して (4) により $\varphi_1, \dots, \varphi_m$ ($= \text{定数} \neq 0$) が定められて、その間のすべての l に対して $|a_0^{(l)}| > |a_{n_l}^{(l)}|$ であることである。

方法 1

全根を内に含む円の半径を十分小さく見積る。初期値が根に近い分だけ、速い収束が期待される。

$z = R\omega + \beta$ とおき、 $P_n(z)$ を ω の式

$$\begin{aligned} Q(\omega) &= P_n(R\omega + \beta) \\ &= (C_0 R^n) \omega^n + (C_1 R^{n-1}) \omega^{n-1} + \dots \\ &\quad + (C_{n-1} R) \omega + (C_n) \end{aligned}$$

に変換し、前述の定理を用いると、中心 β 、半径 R の円内に $P_n(z)$ の根がすべて含まれるかどうかを判定できる。

Aberth の半径 R_0 と 0 を初期値とする二分法により、全根を内に含む十分小さい円の半径 R_1 を求めることができる (図 1)。(2) 式の R_0 を R_1 に置き換え、新しい初期値とする。これを方法 1 とする。

方法 2

Aberth の方法や方法 1 では、例えば一根の絶対値が他の根の絶対値に比べ極端に大きいために半径の見積りが大きくなり、収束が遅くなっている場合も考えられる。そこで各根からの距離の二乗の総和が最小となるような半径を用いれば、根の分布によらず反復回数がある程度におさえられることが期待される。

方法 1 で求めた半径 R_1 を二分割しながら、各半径の円の内外の根の個数を調べる。 j 回の反復で幅 $R_1 \times (1/2)^j$ の円環 D_j ($i=1, 2, \dots, m, m \leq 2j$),

$\bigcap_{i=1, \dots, m} D_i = \phi, \bigcup_{i=1, \dots, m} D_i \supset \{\alpha_1, \dots, \alpha_n\}$ が求まる.

円環 D_i の内径と外径の平均を R_i^* , D_i に含まれる根の個数を N_i とすると, 求める半径 R_2 は,

$$R_2 \doteq \left(\sum_{i=1}^m R_i^* \times N_i \right) / n$$

で得られる. (2)式の R_0 を R_2 で置き換え, 新しい初期値とする. これを方法2とする.

分割回数を増やせば, より厳密な R_2 の値が得られるが, ここではおおまかなものがわかればよいので, j は数回程度でよい.

図2に, 方程式

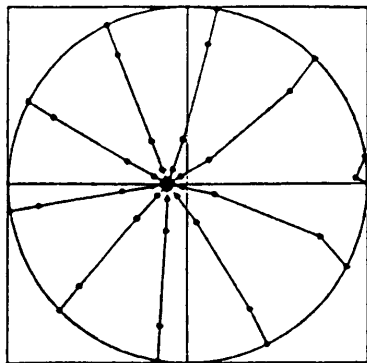
$$(z+1)(z-1)(z+i)(z-i)(z+2)(z-2)(z+2i)(z-2i)(z-100)z=0$$

に対して, Aberth の方法と方法2の初期値を用いた時の収束の様子を示す (横軸は反復回数).

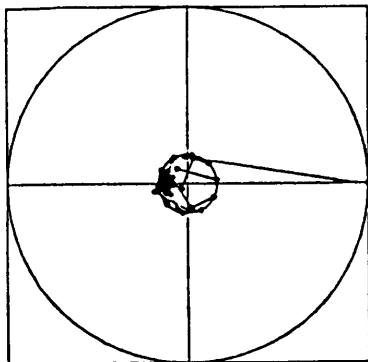
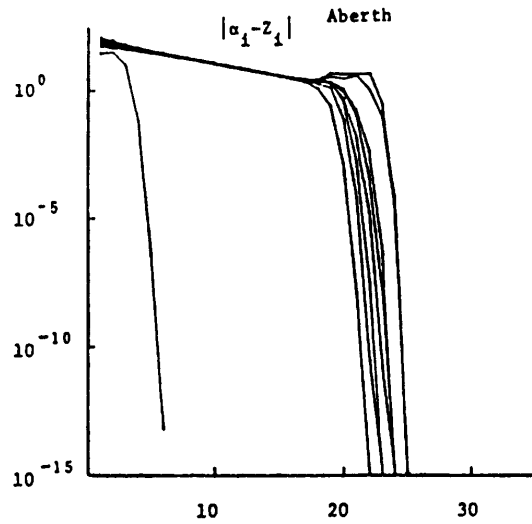
計算の手間

方法1, 2の初期値は定理を各々数回用いて得られるので, 初期値を求める演算の手間が, その初期値を用いることにより減少する DK 法の演算の手間の分を下回れば, 収束の効率が上がったことになる.

演算の手間の比較は, 必要な演算回数をすべて実数



Aberth $R_0=0.900001D+02$



Meth-2 $R_2=0.146250D+02$

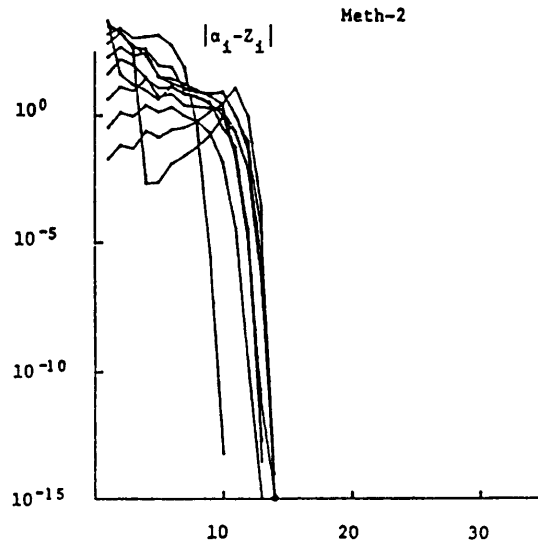


図2 Aberth の方法と方法2の初期値と収束の様子

Fig. 2 Behaviour of convergence for the initial values of Aberth and Method-2.

演算に換算し、加減算：1.7、除算：2.3、exp：17、log：11 の重みをつけた演算時間の比較で行った。この重みは、数値実験に使用した PC 9801 E で Pro FORTRAN (倍精度) により実測した結果である。

これより DK 法の反復 1 回に必要な演算の手間と、定理 1 回の判定に必要な演算の手間の比は、

$$\frac{\text{DK 法}}{\text{定理}} = \frac{5.4n^2 + 51.9n - 14.5}{43.4n^2 + 13.8n} \rightarrow \frac{1}{8} \quad (n \rightarrow \infty)$$

となり、高次になると定理の判定には、DK 法の反復計算の約 1/8 の手間しか必要としないことになる。

誤差解析と収束判定

DK 法の各反復段階における近似値 $z_i (i=1, \dots, n)$

- Aberth
- △ Meth-1
- Meth-2
- 根

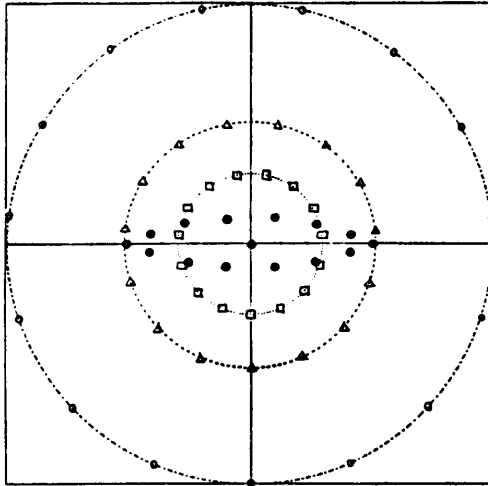
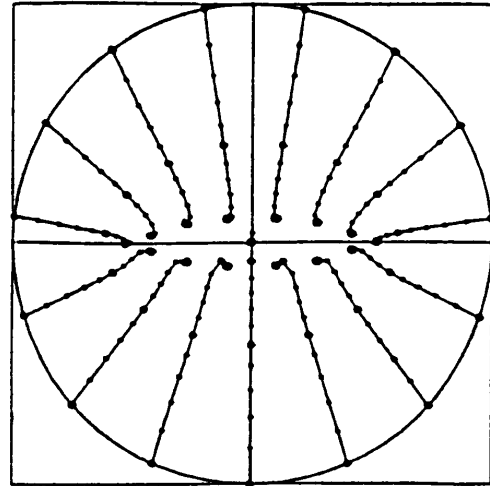
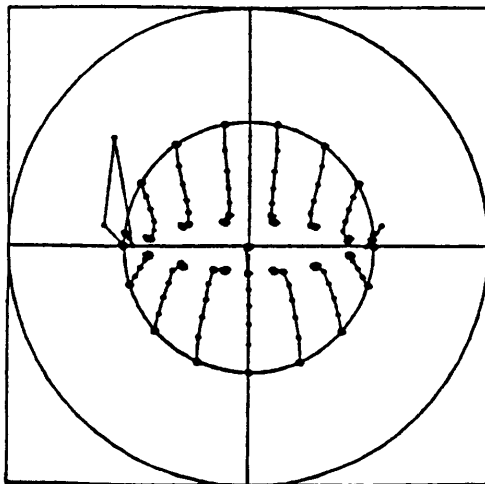


図 3 各初期値の分布の様子 (Chebyshev, 15 次)
Fig. 3 The distribution of initial values for each method (Chebyshev, degree 15).



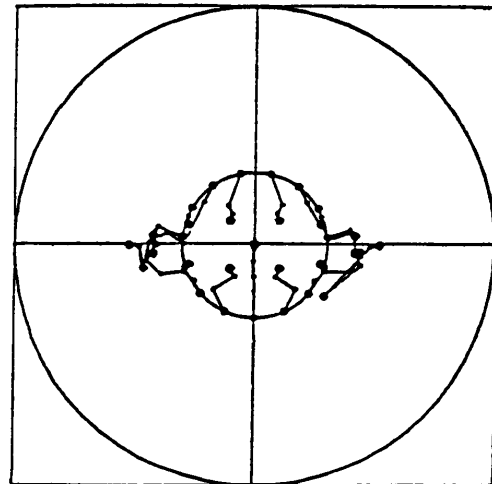
$$R_0 = 0.182229D+01$$

図 4 Aberth
Fig. 4 Aberth.



$$R_1 = 0.952030D+00$$

図 5 方法 1
Fig. 5 Method-1.



$$R_2 = 0.550381D+00$$

図 6 方法 2
Fig. 6 Method-2.

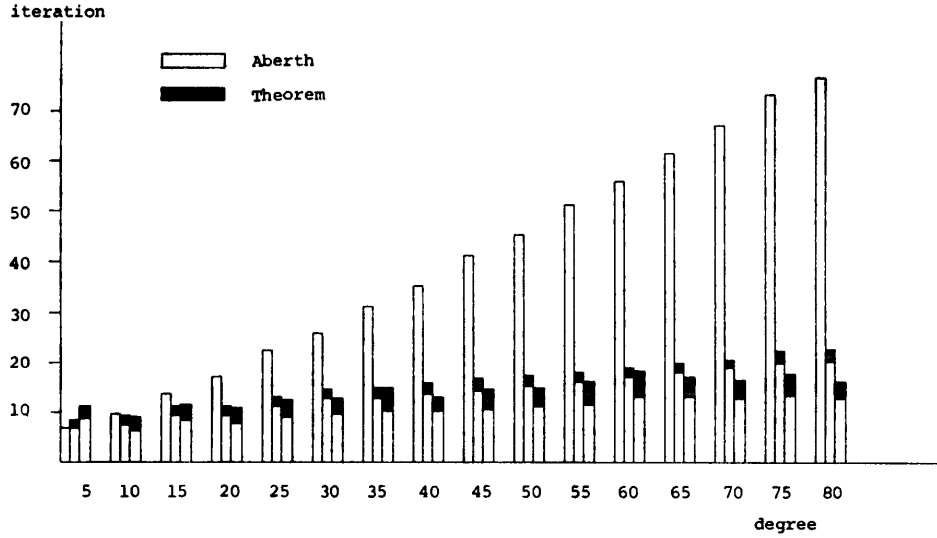


図 7 5次から80次の方程式に対する反復回数 (Chebyshev の方程式)

Fig. 7 Iteration numbers for equations of degree 5 to 80 (Chebyshev).

に含まれる誤差は, Smithの方法により, DK 2次法の反復公式 $\varphi_i(z)$ を用いて

$$|z_i + \varphi_i(z) - \alpha_i| \leq (n-1)|\varphi_i(z)|$$

あるいはもっと粗く

$$|z_i - \alpha_i| \leq n|\varphi_i(z)|$$

で厳密に見積ることができる.

ここで $\varphi_i(z)$ は,

$$\varphi_i(z) = \varphi_i(z_1, \dots, z_n) = \frac{P_n(z_i)/a_0}{\prod_{\substack{j=1, \dots, n \\ j \neq i}} (z_i - z_j)}$$

である. 数値実験では, 後者を採用した.

$P_n(x)$, $P'_n(x)$ の値の計算, および変数変換した式の係数の計算には, Horner 法を用いた³⁾.

$$\begin{cases} b_0 = a_0 \\ b'_k = z \cdot b_{k-1} \\ b_k = b'_k + a_k \quad (k=1, \dots, n). \\ P_n(z) = b_n \end{cases}$$

上記の加, 乗算により生じる丸め誤差を E_m (マシンプシロン) とすると, b_k の誤差 ε_k は

$$\begin{cases} \varepsilon_0 = 0 \\ \varepsilon_k = |z| \varepsilon_{k-1} + E_m(|b'_k| + \max(|a_k|, |b'_k|, |b_k|)) \end{cases}$$

となる. $P_n(z) = b_n$ であるので, $|P_n(z')| < \varepsilon_n$ ならば, z' は十分収束した値とみなすことができる.

3. 数値例

数値実験は以下の2つについて行った. 各々, 方法1の半径を求める際の分割は10回, 方法2の半径を

求める際の分割は $j=3$ として行った. また計算の手間においては, $n=5 \sim 80$ の範囲なので, 定理の判定は DK 法の反復計算の約 1/5 となる.

(1) Chebyshev の数値積分公式

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i)$$

の分点 x_i を根としてもつ方程式

$$F_n(z) = a_0 z^n + a_1 z^{n-1} + \dots + \begin{cases} a_{n-1} z & (n: \text{奇数}) \\ a_n & (n: \text{偶数}) \end{cases}$$

$$a_0 = 1, \quad a_{2k} = -\frac{n}{2k} \sum_{j=1}^k \frac{1}{2j+1} a_{2(k-j)} \quad (k=1, 2, \dots)$$

$n \rightarrow \infty$ のとき, 根は $|(z+1)^{(n+1)/2} (z+2)^{(n+2)/2}| = 2$ の上に並ぶ⁴⁾.

方程式の根は係数に敏感なことが多いので, $F_n(z)$ の係数の計算には多倍長計算を行い, 計算桁数いっぱい精度で求められるようにした.

15次の各初期値の分布, および収束の様子を図3~6に示す. 5~80次の各初期値による反復回数の比較を図7に示す(左より Aberth, 方法1, 方法2).

図7より, 15次以上では, Aberthの初期値は際立って反復回数が多くなっていることがわかる. 方法1と方法2の初期値は, (初期値を求める手間も考えに入ると) あまり差異はない. これは, この例の根と重心との距離がほぼ一様であるためと考えられる.

(2) 一様乱数から $z = x + iy$ ($-10 \leq x, y \leq 10$) を生成し, その値を根にもつ方程式.

はじめに,

$$r_{k+1} = ar_k + c \pmod{m}$$

ただし,

$$a = 1229, \quad c = 351750, \quad m = 1664501$$

を用いて $[0, 1]$ 区間の一様乱数を作り, $[-0.5, 0.5]$ に移動した後 $[-10, 10]$ に拡張した値を順次 x, y に割り当てて z を生成した⁵⁾.

次数 15, 30, 50, 80 に対し各々 20 組の乱数の根を用いて実験を行った.

図 8~11 は, $n=15$ における 1 つの例である. 図 12 に, 80 次の 20 組の乱数データに対する反復回数を示す. 図 13 は, Aberth の半径の見積りの大きさと反復回数との関係を示す.

図 11 に見られるように方法 2 では, 反復の途中で

- Aberth
 - △ Meth-1
 - Meth-2
- 根

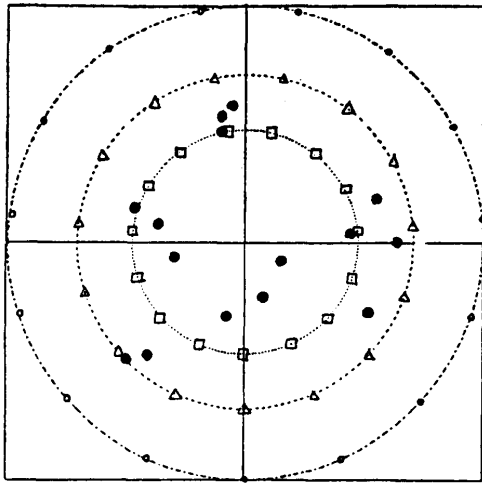
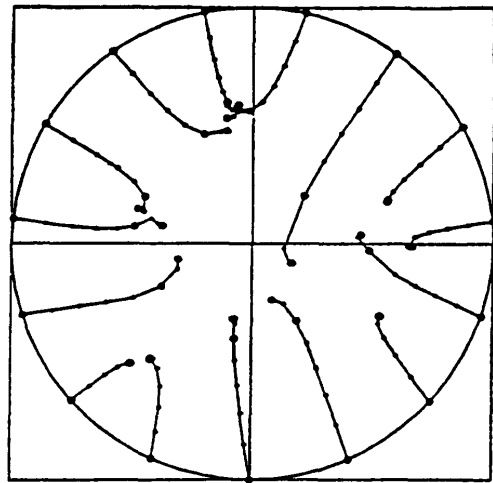
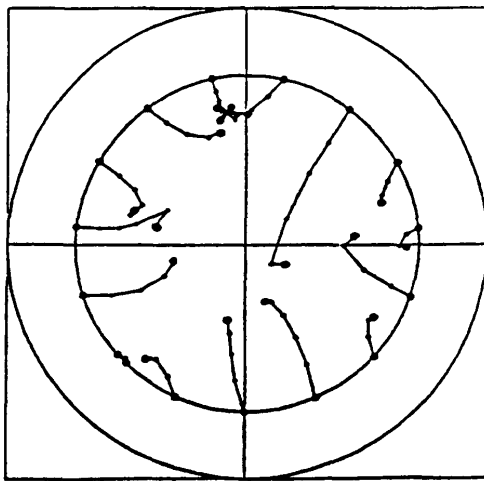


図 8 各初期値の分布の様子 (乱数データ, 15 次)
Fig. 8 The distribution of initial values for each method (random data, degree 15).



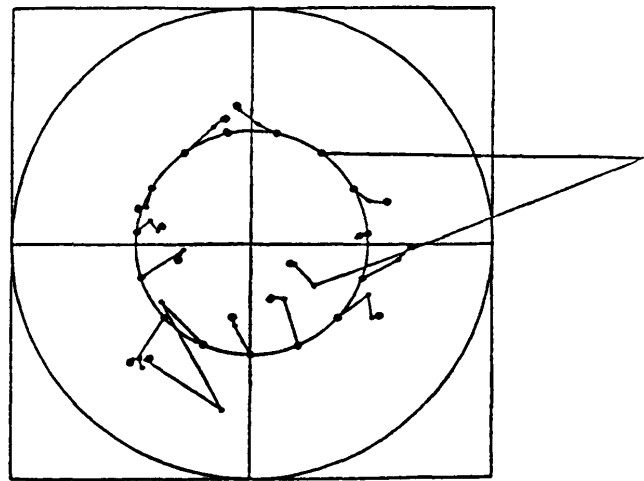
$$R_0 = 0.146676D+02$$

図 9 Aberth
Fig. 9 Aberth.



$$R_1 = 0.104994D+02$$

図 10 方法 1
Fig. 10 Method-1.



$$R_2 = 0.704334D+01$$

図 11 方法 2
Fig. 11 Method-2.

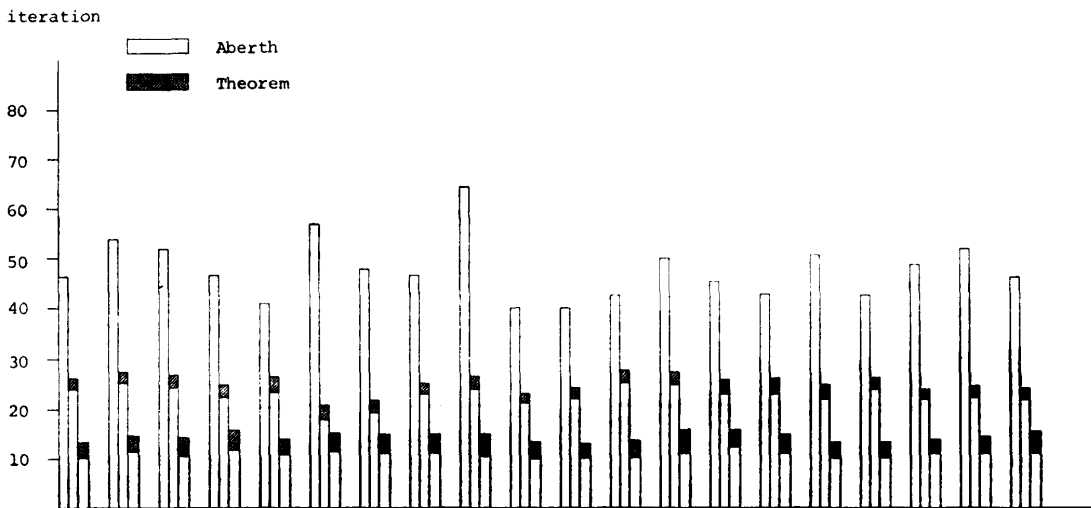


図 12 反復回数 (乱数データ, 80 次)
Fig. 12 Iteration numbers (random data, degree 80).

重心からの絶対値がかなり大きくなるものもあるが、今回の実験ではいずれの場合も最終的には収束し、発散した例は1つもみられなかった。

図 12 に 80 次の反復回数を示す。Aberth の方法は際立って反復回数が多いことがわかる。また、方法 2 の方が方法 1 よりも反復回数が少ない。その上、方法 2 はデータによらず反復回数がほぼ一定している。

図 13 より、Aberth の半径の見積りが大きい時は反復回数も多くなる傾向があることがわかる。

4. おわりに

2つの実験結果より、DK 法は初期値のとり方により収束の速さが大きく左右されること、Aberth の初期値は方程式が高次になるにつれて収束がかなり遅くなり、あまり良い初期値とはいえないことが確かめられた。このような結果が得られるであろうことは、すでに指摘されている⁶⁾。

したがって DK 法は、その大域的収束性に頼らずに、根にできるだけ近い初期値を選んで反復計算を始めることが望ましく、具体的には方法 2 の初期値が Aberth の初期値に代わる一般性をもった初期値として有効である。

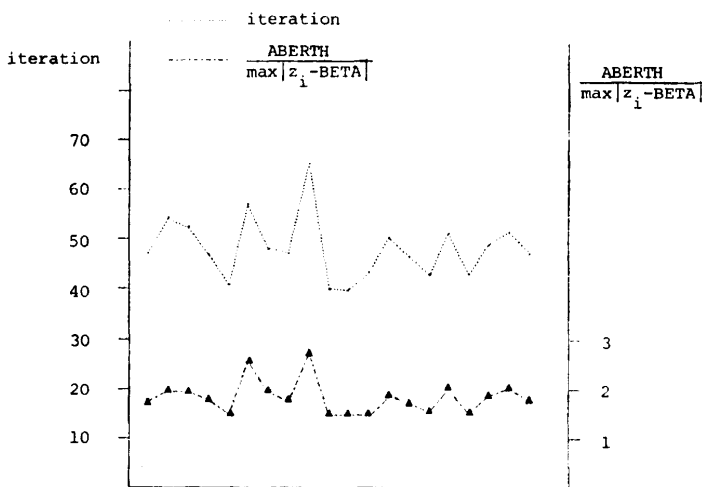


図 13 Aberth の半径と反復回数の関係 (乱数データ, 80 次)
Fig. 13 Relation between the radius of Aberth and iteration number (random data, degree 80).

参 考 文 献

- 1) 山本哲朗, 古金卯太郎, 野倉久美: 代数方程式を解く Durand-Kerner 法と Aberth 法, 情報処理, Vol. 18, No. 6, pp. 566-571 (1977).
- 2) 山本哲朗: ある代数方程式解法と解の事後評価法, 数理科学, Vol. 14, No. 7, pp. 52-57 (1976).
- 3) 伊理正夫: 数値計算 (理工系基礎の数学 12), 朝倉書店, 東京 (1981).
- 4) 小野令美: Durand-Kerner 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).

- 5) 森 正武: FORTRAN 77 数値計算プログラミング (岩波コンピュータサイエンス), 岩波書店, 東京 (1986).
- 6) 山本哲朗: 数値解析入門 (サイエンスライブラリ現代数学への入門 14), p. 155, サイエンス社, 東京 (1976).

(昭和 63 年 6 月 29 日受付)
(昭和 63 年 10 月 7 日採録)



中田 多美

昭和 35 年生。昭和 58 年東京女子大学文理学部数理学科卒業。同年筑波大学電子・情報工学系技官となり、現在に至る。



川本 則行

昭和 38 年 8 月 21 日生。昭和 61 年筑波大学第三学群情報学類情報工学科卒業。日本 DEC AI システム部システム第 2 課勤務。



名取 亮 (正会員)

昭和 16 年生。昭和 39 年東京大学工学部物理工学科卒業。昭和 44 年同大学院博士課程修了。工学博士。東京大学大型計算機センター助手、電気通信大学助教授、筑波大学助教授を経て現在筑波大学教授。数値解析の研究に従事。著書「数値計算」(岩波, 共著), 「数値解析講義」(産業図書, 共訳) ほか。日本物理学会, 日本数学会, 計測自動制御学会各会員。