

非線形代数方程式系の解法パッケージNAESにおける数式処理

--- 重根について ---

小鹿丈夫(大阪教育大), 三井斌友(福井大), 渡部 敏(東北歯科大)

1. はじめに

つぎのような非線形連立代数方程式を考える:

$$F(x) = 0, \quad (1.1)$$

ここで x と $F(x)$ は n 次元実数空間の有界領域で連続2階微分可能であるとする。この方程式系の数値解を求めるために多くの方法が古くから考案され、その多くはFORTRANのような数値処理言語によって実現されている。しかし、数値処理言語では数式微分、数式の代入とか数式を成分とする行列式の計算といった数学的演算を取扱うことが困難である。最近になってREDUCE [1]といった数式処理言語を実際に用いてこのような数式演算を計算機で扱えるようになった。

著者らは、数値処理(FORTRAN)と数式処理(REDUCE)を併用することにより(これをハイブリッド処理と呼ぼう)、非線形代数方程式系を効率良く解くためのパッケージNAES(Nonlinear Algebraic Equations Solver)を開発し、実用段階に至っている、[2, 3, 4, 5]。さらに、急激な技術革新によりパソコンが個人的レベルで普及してきたので、BASIC言語による数値処理及び数式処理によって非線形代数方程式を取り扱おうという試みもなされてきている。[6, 7]。

この報告では、まずパッケージNAESにおける処理の大筋を述べる。次に方程式系の解が重根である場合を効率良く且つ高精度に解くためのデフレーション・アルゴリズムを取り上げ、その中で数値処理と数式処理とがどのように実際に行なわれているかを示す。このために、重根の性質やJacobi行列が特異(singular)になるとき4つのカテゴリーを与える。最後に、具体例を通して上記のアルゴリズムの働きを例示する。

2. NAESの概要

パッケージNAESにおいては、非線形方程式系は利用者によりFORTRAN形式で与えられる。数値処理はFORTRANによって実行されるが、他方、数式処理はREDUCE [1]によって行なわれる。このときの数値処理と数式処理の間の情報の流れを図1に示す。

図1における(A)で解くべき方程式系(1.1)と出発値 x^0 がFORTRAN形式で与えられる。パッケージNAESにおける第1の仕事は、(B)においてFORTRAN形式で表現された系のデータをREDUCE形式に変換することである。次に(C)に入って利用者の方程式系に対する方程式行列(C.1)を作成する。これは(C.2)における系の構造解析を行なうために必要である、[8]。この段階で、系の階層構造が完全に把握される。この構造データを用いて(C.3)における系の階層、レベル、グループごとに分割したものを、FORTRAN形式のサブルーチンの形に再構成し、(B)を経由して(D)に戻る。(D)では数値計算の準備ができたので(D.1)が働く。すなわち、Newton-Raphson法の数値的实现である ϵ -セカント法が行なわれる。[9] ϵ -セカント法の主要な部分は第一に数値微分である。ここでは従来のような偏微分は必要ではないので、解法の大巾な効率化をもたらす実用性を高めている。次に数値微分によってJacobi行列を作ってから、Gaussの消去法を行なう。これが ϵ -セカント法の第二の要素である。これによって k 回目の近似解 x^k から改良された $k+1$ 回目の近似解 x^{k+1} を得る。

このとき色々な現象が生じるので、それらを監視して適切な処置を行なうために次のような量を計算する:

- (i) $k_G = \left[\frac{1}{n} F'(k_X) F(k_X) \right]^{1/2}$
 $[k_G / k^{-1}G], k=1,2,\dots$
- (ii) $F_X(k_X) = (\text{Jacobian matrix}) = (d_{ij}(k_X)),$
 $k_d = \det(F_X(k_X))$
 $[k_d / k^{-1}d], k=1,2,\dots$
- (iii)
 $[d_{ij}(k_X) / d_{ij}(k^{-1}X)], \quad i, j=1, \dots, n.$

このとき $k_G \downarrow 0$ 且つ $|k_G / k^{-1}G| \leq 0.5$ なら求めようとしている根は単根と判断する。さもなければ、重根の可能性があるので、Gaussの消去法において行と列の入れ換えを凍結して反復し、Jacobi行列 J の各成分の変化を (iii) のような量で監視する。これらが次節で述べるような重根の性質によって、ある種の条件を満たすときには、近似解の近づく先は重根であると判断する。そして (D. 2) にあるような数値的デフレーション・アルゴリズムを発動させて、後につづく REDUCE による数式的デフレーション・アルゴリズム (C. 4) による処理の準備体制をととのえる。次に (B. 1) を通って (C. 4) の処理を行ない、(C. 3) においてデフレーションの結果に基づいた方程式系の再編成を実行して、新しいサブルーチンを FORTRAN 形式で作成する。これで処理は一順し、再び (D) から計算を再開する。デフレーションの必要がなく、解が求まれば (E) において終了する。

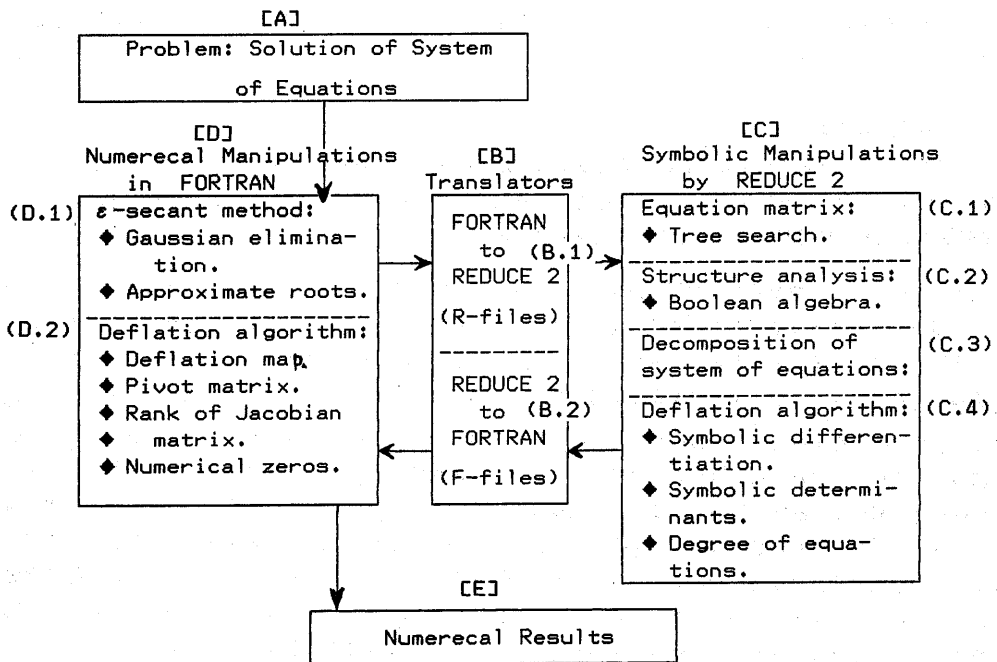


図1. ハイブリッド処理NAESにおける情報の流れ

3. MULTIPLE ROOTS

One dimensional case

A root x^* of the NAE is said to have multiplicity m if

$$f(x) = (x - x^*)^m \bar{f}(x) = 0, \quad m \geq 1, \quad 0 < |\bar{f}(x^*)| < \infty. \quad (3.1)$$

(k+1)-st N-R iteration:

$$(m\bar{f}^{(k)}(x) + \{x^{(k)} - x^*\})^{(k+1)}(x - x^{(k)}) = -(x^{(k)} - x^*)\bar{f}^{(k)}(x). \quad (3.2)$$

Taylor series:

$$x^{(k+1)} - x^* = (m-1)/m (x^{(k)} - x^*)^2 + O((x^{(k)} - x^*)^3), \quad \eta = x - x^*. \quad (3.3)$$

Theorem 3.1. If $\{x^{(k)}\} \rightarrow x^*$, then

- (i) $\lim_{k \rightarrow \infty} f(x^{(k)}) \rightarrow 0,$
- (ii) $\lim_{k \rightarrow \infty} [f(x^{(k+1)})/f(x^{(k)})] = \left(\frac{m-1}{m}\right)^m,$
- (iii) $\lim_{k \rightarrow \infty} f_x(x^{(k)}) = \begin{cases} f_x(x^*) & \text{if } m = 1, \\ 0 & \text{if } m \geq 2 \end{cases} \quad (3.4)$
- (iv) $\lim_{k \rightarrow \infty} [f_x(x^{(k+1)})/f_x(x^{(k)})] = \left(\frac{m-1}{m}\right)^{m-1} \begin{cases} = 1, & \text{if } m=1, \\ \leq 0.5, & \text{if } m \geq 2, \end{cases}$
- (v) $\lim_{k \rightarrow \infty} [\Delta^{k+1}x / \Delta^kx] = \left(\frac{m-1}{m}\right), \quad \Delta^kx = x^{(k+1)} - x^{(k)}.$

4. DEFLATION ALGORITHM

$$F(X) = \begin{pmatrix} f_1(X) \\ \vdots \\ f_n(X) \end{pmatrix} = 0, \quad X = (X_1, \dots, X_n), \quad (4.1)$$

$$F(X^*) = 0, \quad \det F_X(X^*) = 0.$$

Table 3.1. Properties of roots

	simple root	multiple root	singular case
$ f(x^{(k+1)}) $	$\ll 1$	$\ll 1$	$\gg 1$
$Y = f(x^{(k+1)})/f(x^{(k)}) $	$\ll 1$	$\left(\frac{m-1}{m}\right)^m$	$\gg 1$
$ d(x^{(k+1)}) $	$\bar{f}(x^*)$	$\ll 1$	$\ll 1$
$Z = d(x^{(k+1)})/d(x^{(k)}) $	1	$\left(\frac{m-1}{m}\right)^{m-1}$	$\ll 1$
$X = \Delta^{k+1}x/\Delta^kx $	$\ll 1$	$\left(\frac{m-1}{m}\right)$	$\gg 1$

N-R iteration:

$$F_X^{(k_X)}(X^{k+1} - X^k) = -F^{(k_X)}. \quad (4.2)$$

4.1. Deflation

(I) Pivot matrix P: Assume that $r = \text{rank } F_X^{(k_X)} (\leq n-1)$,

$$P = \begin{pmatrix} f_1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ f_r & x_r \\ \vdots & \vdots \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

(II) Deflation matrix D_j :

$$D_j = \begin{matrix} & x_1 & \dots & x_r & x_j \\ \begin{matrix} \partial f_1 / \partial \\ \vdots \\ \partial f_r / \partial \\ \partial f_j / \partial \end{matrix} & \begin{pmatrix} d_{11} & \dots & d_{1r} & d_{1,r+1} \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ d_{r1} & \dots & d_{rr} & d_{r,r+1} \\ d_{r+1,1} & & d_{r+1,r} & d_{r+1,r+1} \end{pmatrix} \end{matrix}, \quad (4.4)$$

$j = j+1, \dots, n.$

(III) Eliminated matrix E_j of D_j .

$$E_j = \begin{pmatrix} e_{11} & e_{12} & \dots & e_{1r} & e_{1,r+1} \\ & e_{22} & \dots & e_{2r} & e_{2,r+1} \\ & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & \cdot & \cdot \\ & & & \cdot & \cdot \\ & & & & \cdot \\ & & & & e_{rr} & e_{r,r+1} \\ & 0 & & & & e_{r+1,r+1} \end{pmatrix} \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ r \\ r+1 \end{matrix} \quad (4.5)$$

(i) $e_{r+1,r+1}^* = \det D_j^* = 0,$

(ii) $|e_{ii}^{k+1} / e_{ii}^k| \approx 1, \quad i = 1, 2, \dots, r, \quad (4.6)$

(iii) $|e_{jj}^{k+1} / e_{jj}^k| \leq \frac{1}{2}, \quad j = r+1, \dots, n.$

(IV) The ℓ -th deflated equations

$$F^{[\ell]}(X) = \begin{pmatrix} f_1^{[\ell]}(X) \\ \vdots \\ f_r^{[\ell]}(X) \\ f_{r+1}^{[\ell]}(X) \\ \vdots \\ f_n^{[\ell]}(X) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1^{[\ell]}(X) \\ \vdots \\ f_r^{[\ell-1]}(X) \\ \det D_{r+1}^{[\ell-1]} \\ \vdots \\ \det D_n^{[\ell]} \end{pmatrix} = 0, \quad \ell = 1, 2, \dots \quad (4.7)$$

4.2. Computational realization

(I) Category 1. (numerical zeros)

$$\text{Ex. } F_X(X^*) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 3 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad 0: \text{numerical zero.}$$

(II) Category 2. (nontrivially proportional rows)

$$\text{Ex. } F_X(X^*) = \begin{matrix} i \\ j \end{matrix} \begin{bmatrix} 2 & 3 & 0 & 4 \\ 3 & 4.5 & 0 & 6 \end{bmatrix}.$$

(III) Category 3. (nontrivially proportional columns)

$$\text{Ex. } F_X(X^*) = \begin{matrix} i & j \\ 2 & 3 \\ 3 & 4.5 \\ 0 & 0 \\ 4 & 6 \end{matrix}, \quad \begin{matrix} 0: \text{numerical zero,} \\ 0: \text{algebraic zero.} \end{matrix}$$

(IV) Category 4. (otherwise cases of Categories 1 through 3)

5. SOLVED EXAMPLES BY NAES

5.1. Example 0

System of equations: Sol. $X^* = (1, 1, 3, -2, -1, -2)$; guess $X = (2, 7, 4, -4, 2, -3)$.

$$\begin{cases} f_1 = x_3 e^{x_2 + x_6} - 2x_5 - 3e = 0, \\ f_2 = x_1^2 + x_4 + 1 = 0, \\ f_3 = 3x_2 + x_4 + x_6 - 1 = 0, \\ f_4 = 2x_3 + 3x_5 - 3 = 0, \\ f_5 = 2x_1 + 0.5x_4^2 - 4 = 0, \\ f_6 = x_2 - 2x_6 - 5 = 0. \end{cases}$$

Rearranged system:

[1st Subsystem]

$$\langle 1\text{st level} \rangle: \quad [x_2 \quad x_6 : f_3 \quad f_6] \quad \begin{cases} f_3 = 3x_2 + x_6 - 1 = 0, \\ f_6 = x_2 - 2x_6 - 5 = 0. \end{cases}$$

$$\langle 2\text{nd level} \rangle: \quad [x_3 \quad x_5 : f_1 \quad f_4] \quad \begin{cases} f_1 = x_3 e^{x_2 + x_6} - 2x_5 - 3e = 0, \\ f_4 = 2x_3 + 3x_5 - 3 = 0. \end{cases}$$

[2nd Subsystem]

$$\langle 1\text{st level} \rangle: \quad [x_1 \quad x_4 : f_2 \quad f_5] \quad \begin{cases} f_2 = x_1^2 + x_4 + 1 = 0, \\ f_5 = 2x_1 + 0.5x_4^2 - 4 = 0. \end{cases}$$

5.2. Example 1 (Category 1) [5]

System of equations: Sol. $X^* = (0, 0, 1)$; guess $X = (0.5, 0.5, 0.7)$.

$$\begin{cases} f_1 = x_1 + x_2 + x_3 - 1 = 0, \\ f_2 = 0.2x_1^3 + 0.5x_2^2 - x_3 + 0.5x_3^2 + 0.5 = 0, \\ f_3 = x_1 + x_2 + 0.5x_3^2 - 0.5 = 0. \end{cases}$$

Deflation algorithm in numerical manipulations:

$$|{}^6e_{ii} / {}^5e_{ii}| = (1.000, 0.501, 0.500), \quad \text{rank of Jacobi matrix} = 1.$$

$$|d({}^6x)| = 0.115 \times 10^{-3}$$

$$S = 0.928 \times 10^{-4}$$

DM-map (Deflation map):

$$\left[\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \end{array} \right]$$

Jacobian matrix:

$$F_x(x^*) = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0.6x_1^2 & x_2 & -1+x_3 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}^* = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Rank($F_x(X^*)$)=1.

Pivot matrix:

$$P = \begin{bmatrix} \#f & \#x \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Numerical zeros:

$$\begin{aligned} z_1 &= 0.6x_1^2, & \deg(z_1) &= 0 & (\text{degree is considered except } x_1.) \\ z_2 &= x_2, & \deg(z_2) &= 1, \\ z_3 &= -1+x_3, & \deg(z_3) &= 1. \end{aligned}$$

Deflated system:

$$\begin{cases} f_1^{[1]} = f_1 = x_1 + x_2 + x_3 - 1 = 0, \\ f_2^{[1]} = z_2 = x_2 = 0, \\ f_3^{[1]} = z_3 = -1 + x_3 = 0. \end{cases}$$

Numerical result:

k	k_S	k_S / k^{-1}_S	$ k_d $	$ k_d / k^{+1}_d $
0	0.687x10(0)		0.135x10(0)	
1	0.350x10(0)	0.509x10(0)	0.118x10(0)	0.874x10(0)
2	0.241x10(-1)	0.689x10(-1)	0.285x10(-1)	0.242x10(0)
3	0.589x10(-2)	0.248x10(0)	0.725x10(-2)	0.254x10(0)
4	0.149x10(-2)	0.249x10(0)	0.115x10(-3)	0.251x10(0)
5	0.372x10(-3)	0.249x10(0)	0.458x10(-2)	0.250x10(0)
6	0.928x10(-4)	0.249x10(0)	0.115x10(-3)	0.251x10(0)
7	0.242x10(-13)	0.261x10(-9)	0.100x10(1)	0.870x10(4) 1st defl.

5.3. Example 2 (Category 2)

System of equations: Sol. $X^* = (2, 3, 4)$; guess $^0X = (1, 2, 3)$.

$$\begin{cases} f_1 = -x_1 x_2 - x_1 x_3 + 5x_1 + 4 = 0, \\ f_2 = -x_1 x_2 - x_2 x_3 - 3x_1 - 3x_3 + 36 = 0, \\ f_3 = 2x_1 - x_2 + x_3 - 5 = 0. \end{cases}$$

Deflation algorithm in numerical manipulations:

$$|{}^6e_{ii} / {}^5e_{ii}| = (1.001, 0.999, 0.500), \text{ rank of Jacobian matrix} = 2.$$

$$|d({}^5X) / d({}^4X)| = 0.183 \times 10(0)$$

$${}^6S = 0.412 \times 10(-4).$$

DM-map (Deflation map):

$$\left[\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & \\ \hline 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & \end{array} \right]$$

DM(4,4)=2 means Category 2.

Jacobian matrix:

$$F_X(X^*) = \begin{bmatrix} -x_2 - x_3 + 5 & -x_1 & -x_1 \\ -x_2 - 3 & -x_1 - x_3 & -x_2 - 3 \\ 2 & -1 & 1 \end{bmatrix}^* = \begin{bmatrix} -2 & -2 & -2 \\ -6 & -6 & -6 \\ 2 & -1 & 1 \end{bmatrix}.$$

$$\text{Rank}(F_X(X^*)) = 2.$$

Pivot matrix:

$$P = \begin{bmatrix} \#f & \#x \\ 2 & 1 \\ 3 & 2 \end{bmatrix}$$

Numerical zeros: (degree is considered except x_1 and x_3 .)

$$z_1 = \det \begin{bmatrix} -x_2 - x_3 + 5 & -x_1 \\ -x_2 - 3 & -x_1 - x_3 \end{bmatrix} = x_1 x_3 + x_2 x_3 + x_3^2 - 8x_1 - 5x_3, \quad \text{deg}(z_1) = 2,$$

$$z_2 = \det \begin{bmatrix} -x_2 - x_3 + 5 & -x_1 \\ -x_2 - 3 & -x_2 - 3 \end{bmatrix} = -x_1 x_2 + x_2^2 + x_2 x_3 - 3x_1 - 2x_2 + 3x_3 - 15, \quad \text{deg}(z_2) = 1,$$

$$z_3 = \det \begin{bmatrix} -x_1 & -x_1 \\ -x_1 - x_3 & -x_2 - 3 \end{bmatrix} = -x_1^2 + x_1 x_2 - x_1 x_3 + 3x_1. \quad \text{deg}(z_3) = 1.$$

Deflated system:

$$\begin{cases} f_1^{[1]} = f_2 = -x_1 x_2 - x_2 x_3 - 3x_1 - 3x_3 + 36 = 0, \\ f_2^{[1]} = f_3 = 2x_1 - x_2 + x_3 - 5 = 0, \\ f_3^{[1]} = z_2 = -x_1 x_2 + x_2^2 + x_2 x_3 - 3x_1 - 2x_2 + x_3 - 15 = 0. \end{cases}$$

Numerical result:

k	k_S	$k_S / k+1_S$	$ k_d $	$ k_d / k-1_d $
0	0.050x10(1)		0.800x10(1)	
1	0.482x10(1)	0.502x10(0)	0.144x10(2)	0.180x10(1)
2	0.306x10(0)	0.635x10(-1)	0.186x10(1)	0.129x10(0)
3	0.103x10(-2)	0.337x10(-2)	0.733x10(0)	0.394x10(0)
4	0.164x10(-3)	0.159x10(0)	0.366x10(0)	0.499x10(0)
5	0.412x10(-4)	0.251x10(0)	0.183x10(0)	0.500x10(0)
6	0.412x10(-4)	0.100x10(0)	0.144x10(3)	0.787x10(3)
7	0.502x10(-11)	0.128x10(-6)	0.144x10(3)	0.100x10(1)
8	0.100x10(-7)	0.199x10(-6)	0.144x10(3)	0.100x10(1)

1st defl.

5.4. Example 3 (Category 3)

System of equations: Sol. $X^* = (0, 0, 0)$; guess $^0X = (0.5, 0.5, 0.5)$.

$$\begin{cases} f_1 = x_1^2 + x_1 + x_2 + x_3 = 0, \\ f_2 = x_1 x_2 + x_2^2 + x_3^2 + x_1 - 2x_2 + x_3 = 0, \\ f_3 = x_1^2 + 2x_1 x_2 + 3x_1 - x_2 + 3x_3 = 0. \end{cases}$$

Deflated system:

$$\begin{cases} f_1^{[1]} = f_3 = x_1^2 + x_1 + 2x_1 x_2 + 3x_1 - x_2 + 3x_3 = 0, \\ f_2^{[1]} = f_2 = x_1 x_2 + x_2^2 + x_3^2 + x_1 - 2x_2 + x_3 = 0, \\ f_3^{[1]} = z_1 = 4x_1 x_3 + 2x_1 - x_2 + 2x_3 = 0. \end{cases}$$

Deflated system:

$$\begin{cases} f_1^{[2]} = f_1^{[1]} = f_3 = x_1^2 + 2x_1 x_2 + 3x_1 - x_2 + 3x_3 = 0, \\ f_2^{[2]} = f_2^{[1]} = f_2 = x_1 x_2 + x_2^2 + x_3^2 + x_1 - 2x_2 + x_3 = 0, \\ f_3^{[2]} = z_1 = 4x_1 x_3 + 4x_2 x_3 + 2x_1 - x_2 + 6x_3 = 0. \end{cases}$$

Numerical result:

k	k_S	k_S / k^{-1}_S	$ k_d $	$ k_d / k^{-1}_d $	
0	0.217x10(1)		0.500x10(1)		
1	0.126x10(1)	0.581x10(0)	0.471x10(1)	0.942x10(0)	
2	0.263x10(0)	0.209x10(0)	0.307x10(1)	0.652x10(0)	
3	0.182x10(-1)	0.692x10(-1)	0.168x10(1)	0.547x10(0)	
4	0.758x10(-2)	0.416x10(0)	0.876x10(0)	0.521x10(0)	
5	0.136x10(-2)	0.179x10(0)	0.445x10(0)	0.508x10(0)	
6	0.354x10(-3)	0.260x10(0)	0.224x10(0)	0.503x10(0)	
7	0.882x10(-4)	0.249x10(0)	0.112x10(0)	0.500x10(0)	
8	0.540x10(-4)	0.659x10(0)	0.225x10(0)	0.201x10(1)	
9	0.546x10(-4)	0.101x10(1)	0.200x10(2)	0.889x10(4)	1st defl.
10	0.143x10(-8)	0.262x10(-4)	0.200x10(2)	0.100x10(1)	2nd defl.
11	0.857x10(-18)	0.599x10(-11)	0.200x10(2)	0.100x10(1)	

5.5. Example 4 (Category 4)

System of equations: Sol. $X^*=(0, 0, 0, 0)$, guess $^0X=(0.5, 0.6, 0.7, 0.8)$.

$$\begin{cases} f_1 = x_1 + x_3 = 0, \\ f_2 = -x_1 + x_2 + x_3 + 2x_4 = 0, \\ f_3 = x_1 + 2x_2 + x_3 + 4x_3^2 + 3x_4 + x_4^2 = 0, \\ f_4 = 3x_1 + 2x_2 - 13x_3 - x_4 = 0, \end{cases}$$

Deflation algorithm in numerical manipulations:

$$|^{11}e_{ii} / ^{10}e_{ii}| = (1.000, 1.000, 1.002, 0.499), \text{ rank of Jacobian matrix} = 3.$$

$$|d(^{11}X)| = 0.323x10(0)$$

$$^{11}S = 0.646x10(-2),$$

DM-map (Deflation map):

$$\left[\begin{array}{cccc|c|c} 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 4 & 0 \end{array} \right]$$

DM(5,5)=4 means Category 4.

Numerical zero:

$$z_1 = \det \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 1+8x_3 & 3+2x_4 \\ 3 & 2 & -13 & -1 \end{bmatrix} = -40x_3 + 40x_4, \quad \deg(z_1)=1.$$

Deflated system:

$$\begin{cases} f_1^{[1]} = f_1 = x_1 + x_3 = 0, \\ f_2^{[1]} = f_2 = -x_1 + x_2 + x_3 + 2x_4 = 0, \\ f_3^{[1]} = f_3 = x_1 + 2x_2 + x_3 + 4x_3^2 + 3x_4 + x_4^2 = 0, \\ f_4^{[1]} = z_1 = -40x_3 + 40x_4 = 0. \end{cases}$$

Numerical result:

k	k_S	k_S / k^{-1}_S	$ k_d $	$ k_d / k^{-1}_d $	
0	0.533×10(1)		0.400×10(1)		
1	0.283×10(2)	0.531×10(1)	0.327×10(3)	0.818×10(2)	
2	0.685×10(1)	0.242×10(0)	0.165×10(3)	0.459×10(0)	
3	0.171×10(1)	0.250×10(0)	0.827×10(2)	0.501×10(0)	
4	0.428×10(0)	0.250×10(0)	0.414×10(2)	0.501×10(0)	
5	0.107×10(0)	0.250×10(0)	0.207×10(2)	0.496×10(0)	
6	0.267×10(-1)	0.250×10(0)	0.103×10(2)	0.498×10(0)	
7	0.669×10(-2)	0.251×10(0)	0.517×10(1)	0.502×10(0)	
8	0.167×10(-2)	0.250×10(0)	0.257×10(1)	0.501×10(0)	
9	0.418×10(-3)	0.250×10(0)	0.129×10(1)	0.498×10(0)	
10	0.104×10(-3)	0.249×10(0)	0.646×10(0)	0.501×10(0)	
11	0.261×10(-4)	0.251×10(0)	0.323×10(0)	0.500×10(0)	1st defl.
12	0.261×10(-4)	0.100×10(1)	0.200×10(3)	0.619×10(3)	
13	0.273×10(-9)	0.105×10(-4)	0.200×10(3)	0.100×10(1)	
14	0.	0.	0.200×10(3)	0.100×10(1)	

6. おわりに

はじめに非線形代数方程式系の数値解を求めるためのパッケージNAESの概要を述べた。数式処理により系の構造解析データから系を自動的に再編成することが可能となった。この新しい系についてニュートン法やε-セカント法を用いて数値解が得られる。特に解が重根のときの処理方法としてデフレーション・アルゴリズムによる数式処理を述べた。方程式系が重根をもつということは系のもつ本質的な構造である。数値計算の途中でそれは色々な形で反映してくる。これまではガウスの消去法で失敗すると強制的に中断していた。デフレーション・アルゴリズムではヤコビ行列から得られる種々なデータから数値的に重根を処理するための準備をして、数式処理を援護している。この関係は相補的である。数値例により4つのカテゴリーのあらわれの様子を示した。

本計算は京大数理解析研究所のDEC2020によった。

< REFERENCES >

- [1] A. C. Hearn, REDUCE 3 User's Manual, The Rand Corporation, Santa Monica, 1983.
- [2] T. Ojika, S. Watanabe and T. Mitsui, NAES User's Manual, (in preparation).
- [3] 小鹿、渡部、三井、連立非線形代数方程式解法パッケージNAESとニュートン法、数理科学、No. 218, 1981
- [4] 小鹿、三井、渡部、非線形代数方程式系の解法パッケージNAES、電子通信学会資料CAS82-172, 1982
- [5] S. Watanabe, Hybrid Manipulations for the Solution of Systems of Nonlinear Algebraic Equations, Publ. RIMS Kyoto Univ., vol.19(2)(1983), 367-395.
- [6] 小鹿、木村、BASICによる代数方程式の数式及び数値処理について、情報処理学会資料、数値解析6-3 1983.
- [7] S. Watanabe, Generation of Equation Matrix for the Structure Analysis of Large Systems of Equations Using a Personal Computer, J. Tohoku Dental Univ., Vol.9(4)(1982), 171-174.
- [8] T. Ojika, Structure analysis for Large Scale Nonlinear Equations, Memo. Osaka Kyoiku Univ., Vol.32(1)(1983), 63-72.
- [9] S. Watanabe, T. Ojika and T. Mitsui, On the Quadratic Convergence Properties of the ε -Secant Method for the Solution of Systems of Nonlinear Equations and its Application to a Chemical Reaction Problem, J. Math. Anal. Appl., Vol. 94, 69-84, 1983.