3次エルミート補間法に基づく根の計算法†

鳥居達生†† 都田艶子††

Abstract

An iterative method for finding a root of analytic function $f(z)$, real valued on real axiis, is described.

We combine the cubic interpolatory iteration and Newton method to modify the convergence, as stated below.

Let z_0 be an approximation of the root ζ of $f(z)$ and $g(z)$ be cubic Hermite interpolating polynmial of $f(z)$ on two points z_0 and its complex conjugate $\bar{z}_0$. If z_0 is sufficiently close to ζ such that z_0 satisfies convergence theorem of Newton iteration owing to Ostrowski[2], then we have Newton iteration. Otherwise we solve $g(z)=0$ and take a root z_1 of $g(z)$ nearest to z_0 as the next approximation of ζ.

Replacinp z_1 by z_0, we continue the same operation.

As an example we apply this algorithm to algebraic equations with real coefficients.

1. はじめに

反復法において初期値を根の十分近くにとったとき収束する方法を局所的方法という．収束の速さが同じならば，初期値として許される範囲が広い方法程よいことはいうまでもない．

$f(z)$ を複素平面のある領域で定義された解析関数とする．点 $z_0, z_1, \cdots, z_m$ 上での $f(z)$ の補間式を $g(z)$ とする．$g(z)$ の適当な一根 z_{m+1} を $f(z)$ の新しい近似根とする．$z_1, z_2, \cdots, z_{m+1}$ を $z_0, z_1, \cdots, z_m$ とみなし，同様な操作を続ける．ただし補間点が1点に集中したとき，補間式はその点における $f(z)$ の Taylor 展開の部分和となるから後者も（1点における）補間式としてとり扱う．この方法において補間式の次数が1で，補間点の個数が1ならば Newton 法，2ならば逆1次補間法となる．補間式の次数が2で補間点の個数が1ならば一松の方法[1]，3ならば Muller 法となる．ただし前者は実根だけを対象としているので，2次補間式が共役複素根をもつとき，その平均を次の近似値にとっている．

Ostrowski は，経験的事実として解析関数の零点を，その補間式の零点で近似する上述の方法の収束性は，初期値に敏感に影響されないと述べている[2]．この事実は Muller 法などを通じ得られたものであろうから補間式の次数は，2以上と解釈すべきであろう．次数が2を越える場合の計算法が実用になっていない主な原因は，反復のたびごとに低次の代数方程式を解かなければならず，これに時間を要するからであろう．

われわれは補間式 $g(z)$ として3次補間式をとる．上の難点を避けるため反復回数が一定限度を越すと原則として Newton 法に切り換える．換言すれば Newton 法の初期値を他の“一般的”方法で求めることになる．一般的方法のとり方によって，いろいろ組み合せが考えられる[3]．われわれは，一般的方法から Newton 法への切り換えを機械的に行ないたい．そのため，与えられた近似値が Newton 法の初期値として，収束条件を満たしているか否か機械的に判別する必要がある．任意の $f(z)$ に対して，反復ごとにこれを確かめることは容易ではない．しかし $g(z)$ に対する Newton 法の収束条件を各近似値に対して満たしているか確かめることは容易である．

$f(z)$ が実軸上で実数値をとる解析関数のとき，$g(z)$ として $z_0, \bar{z}_0$ (z_0 の共役複素数) 上の3次 Hermite 補間式をとるならば，$g(z)$ は実係数3次多項式となる．収束の速さは実根に対しては4位，共役複素根に対しては2位である．

† A Practical Root-finding Algorithm Based on the Cubic Hermite Interpolation, by Tatsuo Torii and Tsuyako Miyakoda (Faculty of Engineering, University of Osaka)

†† 大阪大学工学部

$f(z)$ が実係数多項式ならば, $g(z)$ の係数は簡単に求まる. また Newton-Bairstow 法の収束性の改良になっている.

2. 計算法とその基礎

計算法は二段階からなる. 第一段階は, $f(z)$ の根をその3次 Hermite 補間式の根で近似する方法である.

第二段階は, Newton 法である. 簡単のため前者を3次補間法とよぶことにする.

$f(z)$ は定義域で $f(z)=\overline{f(\bar{z})}$ を満たすとする. 任意の $z_0(\neq\bar{z}_0)$ をとって, 関数値 $f(z_0)$, 微係数 $f'(z_0)$ より3次 Hermite 補間式 $g(z)$ をつくる.

$$f(z)=g(z)+r(z), \tag{1}$$

$$g(z)=\frac{(z-\bar{z}_0)^2}{(z_0-\bar{z}_0)^2}\left\{f(z_0)+(z-z_0)\left(f'(z_0)-\frac{2f(z_0)}{z_0-\bar{z}_0}\right)\right\}+\frac{(z-z_0)^2}{(\bar{z}_0-z_0)^2}\times\left\{f(\bar{z}_0)+(z-\bar{z}_0)\left(f'(\bar{z}_0)-\frac{2f(\bar{z}_0)}{\bar{z}_0-z_0}\right)\right\},$$

$$r(z)=(z-z_0)^2(z-\bar{z}_0)^2\frac{\theta f^{(4)}(\xi)}{4!}.$$

ここで θ, ξ は適当な複素数で $|\theta|\leq 1$, $\xi\in H(z, z_0, \bar{z}_0)$.

$H(z, z_0, \bar{z}_0)$ は3点 $z, z_0, \bar{z}_0$ から作られる凸包.

$g(z)$ を実係数3次多項式に表わしておく.

$$z=x_0+s, \qquad z_0=x_0+iy_0, \qquad y_0>0$$

とすれば

$$g(z)=g(x_0+s)=(s^2+y_0^2)(\gamma_0 s+\gamma_1)+\gamma_2 s+\gamma_3, \tag{2}$$

$$\gamma_0=\frac{1}{(2iy_0)^2}\left\{f'(z_0)+\overline{f'(z_0)}-\frac{f(z_0)-\overline{f(z_0)}}{iy_0}\right\},$$

$$\gamma_1=\frac{1}{4iy_0}\{f'(z_0)-\overline{f'(z_0)}\},$$

$$\gamma_2=\frac{1}{2iy_0}\{f(z_0)-\overline{f(z_0)}\},$$

$$\gamma_3=\frac{1}{2}\{f(z_0)+\overline{f(z_0)}\}.$$

z_0 が実数ならば, $y_0\to 0$ として上式の右辺の極限値をとれば

$$g(x_0+s)=f(x_0)+f'(x_0)s+\frac{f''(z_0)}{2!}s^2+\frac{f'''(z_0)}{3!}s^3. \tag{3}$$

$g(z_0)$ が定数$\neq 0$ でなければ, 少なくとも一根存在するので, z_0 に最も近い根を $f(z)$ の新しい近似根 z_1 として用いる. z_1 を z_0 と考え同様な操作を続けると点列 $\{z_n\}$ が生成される. $\{z_n\}$ が収束したとすれば, この極限値は $f(z)$ の根 ζ になっていることは容易にわかる.

3次補間法の局所的収束性について述べる. z-平面の原点を ζ に移し $f(z)=f(\zeta+h)=\sum_{k=m}^{\infty} a_k h^k$,

$a_m\neq 0$, $m\geq 1$ とする.

$$g(z)=g(\zeta+h)=c_0+c_1h+c_2h^2+c_3h^3$$

とおけば, $g(z)$ の定義から

$$\begin{pmatrix}1 & h_0 & h_0^2 & h_0^2\\ 0 & 1 & 2h_0 & 3h_0^2\\ 1 & k_0 & k_0^2 & k_0^2\\ 0 & 1 & 2k_0 & 3k_0^2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_0\\ c_1\\ c_2\\ c_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}f(z_0)\\ f'(z_0)\\ f(\bar{z}_0)\\ f'(\bar{z}_0)\end{pmatrix}\equiv\begin{pmatrix}f_0\\ f'_0\\ \bar{f}_0\\ \bar{f}'_0\end{pmatrix}.$$

ただし, $z_0=\zeta+h_0$, $\qquad k_0=\overline{\zeta+h_0}-\zeta$.

この係数行列は Vandermonde 型の行列であって $h_0\neq k_0$ ならば正則である. これを解くと

$$c_0=\frac{1}{(h_0-k_0)^3}\{3h_0k_0(k_0f_0-h_0\bar{f}_0)-k_0^3f_0+h_0^3\bar{f}_0-h_0k_0(h_0-k_0)(k_0f_0'+h_0\bar{f}_0')\},$$

$$c_1=\frac{1}{(h_0-k_0)^3}\{-6h_0k_0(f_0-\bar{f}_0)+(h_0-k_0)\times(2h_0k_0(f_0'+\bar{f}_0')+k_0^2f_0'+h_0^2\bar{f}_0')\},$$

$$c_2=\frac{1}{(h_0-k_0)^3}\{3(h_0+k_0)(f_0-\bar{f}_0)-(h_0^2-k_0^2)\times(f_0'+\bar{f}_0')-(h_0-k_0)(k_0f_0'+h_0\bar{f}_0')\},$$

$$c_3=\frac{1}{(h_0-k_0)^3}\{-2(f_0-\bar{f}_0)+(h_0-k_0)(f_0'+\bar{f}_0')\}$$

(4)

h_0 に最も近い $g(\zeta+h)$ の根を h_1 とする.

まず ζ は複素根 ($\mathrm{Im}\,\zeta\neq 0$) としよう. $|h_0|$ を十分小さくとれば

$$c_0=\frac{1}{(h_0-k_0)^3}\{(m-1)k_0^3a_mh_0^m+(mk_0a_{m+1}+3a_m)\times k_0^2h_0^{m+1}-2imh_0^2k_0^2\,\mathrm{Im}(a_mh_0^{m-1})+O(h_0^{m+2})\},$$

$$c_1=\frac{-1}{(h_0-k_0)^3}\{mk_0^3a_mh_0^{m-1}+O(h_0^m)\},$$

$$c_2=\frac{1}{(h_0-k_0)^3}\{mk_0^2(a_mh_0^{m-1}+2)\mathrm{Re}(a_mh_0^{m-1})+O(h_0^m)\},$$

$$c_3=\frac{-1}{(h_0-k_0)^3}\{-2mk_0\,\mathrm{Re}(a_mh_0^{m-1})+O(h_0^m)\}.$$

ζ が単根, すなわち, $m=1$ ならば $g(\zeta+h)$ は

$O(h_0^2)$ の根を一つ，$O(1)$ の根を高々二つもつので

$$h_1=\left\{\frac{a_2}{a_1}+\frac{i}{2\,\mathrm{Im}\,\zeta}\left(2+\frac{\bar{a}_1}{a_1}\right)\right\}h_0^2+O(h_0^3) \qquad (5\,\mathrm{a})$$

実際，これは（1）からも直接計算により得られる，ζ が重根，すなわち $m\geq 2$ ならば

$$h_1=\frac{m-1}{m}h_0+O(h_0^2). \qquad (5\,\mathrm{b})$$

つぎに ζ を実根とする．このとき各 a_k は実数．$h_0=\rho e^{i\theta}$ とおけば，（4）より

$$c_0=\sum_{k=m}^{\infty}a_k\rho_k\frac{(k-3)\sin(k-1)\theta-(k-1)\sin(k-3)\theta}{4\sin^3\theta},$$

$$c_1=\sum_{k=m}^{\infty}a_k\rho^{k-1}\times\frac{k(\sin(k-2)\theta+\sin(k-4)\theta)-2(k-3)\sin k\theta}{4\sin^3\theta},$$

$$c_2=\sum_{k=m}^{\infty}a_k\rho^{k-2}\{(k-3)(\sin(k+1)\theta+\sin(k-1)\theta)-2k\sin(k-3)\theta\}/4\sin^3\theta$$

$$c_3=\sum_{k=m}^{\infty}a_k\rho^{k-3}\frac{-(k-2)\sin k\theta+k\sin(k-2)\theta}{4\sin^3\theta}$$

が得られる．$m=1$ ならば，$g(\zeta+h)$ は $O(h_0^4)$ の実根を一つ，$O(1)$ の根を高々二つもつ．したがって

$$h_1=\frac{a_4}{a_1}|h_0|^4+O(|h_0|^5). \qquad (6\,\mathrm{a})$$

$m=2$ ならば，必ずしも実根と限らない $O(h_0^2)$ の根を二つ，$O(1)$ の根が一つであるから

$$h_1=\sqrt{\frac{a_4}{a_2}}|h_0|^2+O(|h_0|^{5/2}). \qquad (6\,\mathrm{b})$$

$m=3$ ならば3根とも $O(|h_0|^{4/3})$ であるから

$$h_2=\sqrt[3]{\frac{a_4}{a_3}}|h_0|^{4/3}+O(|h_0|^{5/3}). \qquad (6\,\mathrm{c})$$

上の二式において，平方根，立方根の偏角は h_1 が h_0 に近くなる方をとる．

$m\geq 4$ ならば，$h_1=O(h_0)$ となる．ここで h_0 の係数の限界を z_0 の偏角 θ に無関係に導くことはむつかしい．

しかし $\theta=0$ ならば $h_1=rh_0$ とおき，$g(\zeta+h)=0$ を $a_mh_0^m$ で割り，$O(h_0)$ の項を無視すると

$$\frac{1}{m-3}r^3-\frac{3}{m-2}r^2+\frac{3}{m-1}r-\frac{1}{m}=0 \qquad (6\,\mathrm{d})$$

が得られる．任意の $m\geq 4$ に対して上式の根はすべて単位円内にあることがいえる（たとえば Lehmer-Shur の算法）．いくつかの m に対して（6d）の根を示す．

表 1 （6d）の根(Roots of (6d))

degree	read roots	cmoplex roots
4	0.50000	$0.50000\pm i\ 0.50000$
5	0.62273	$0.68863\pm i\ 0.41002$
6	0.69586	$0.77707\pm i\ 0.33867$
7	0.74494	$0.82753\pm i\ 0.28683$
8	0.78029	$0.85986\pm i\ 0.24826$
9	0.80698	$0.88222\pm i\ 0.21864$
10	0.82787	$0.89856\pm i\ 0.19525$
50	0.96762	$0.98494\pm i\ 0.36728$
100	0.98392	$0.99273\pm i\ 0.01822$

これらの例において絶対値最小の根は実根である．

h_1 を h_0 とみなし同様な操作を続けることによって，次のことが結論づけられる．

初期値 z_0 を根 ζ の十分近くにとるとする．ζ が複素単根ならば $\{z_n\}$ は ζ に2位の速さで収束する．ζ が $m(\geq 2)$ 重根ならば1位で，漸近収束因子は Newton 法と同じく $(m-1)/m$ である．

ζ が実の単根ならば，z_0 が実数，複素数いずれの場合も $\{z_n\}$ は実数列で4位で収束する．ζ が2重根ならば，$\{z_n\}$ は一般に複素数列で2位で収束．3重根ならば $\{z_n\}$ は一般に複素数列で4/3位で収束．m (≥ 4) 重根のとき，$\{z_n\}$ が実数列ならば1位で収束．漸近収束因子は表1の実根の欄で与えられる．

初期値 z_0 を実数（複素数）にとっても複素根（実根）を求めることができる．ただし $\{z_n\}$ の収束を仮定する．

Newton 法において $f'(z_n)=0$ ならば，以後続行不能となる．$|f'(z_n)|$ が0でなくても，桁落ちが大きければ，z_n から z_{n+1} へいわゆる“とぶ現象”が起る．3次補間法においては，$g(z)$ の係数 $\gamma_0,\gamma_1,\gamma_2$ が同時に大きく桁落ちしたとき，とぶ現象が起る．これが収束性をわるくする原因であるが，このような現象が起る可能性は $\gamma_0,\gamma_1,\gamma_2$ が同時に桁落ちするという意味で，Newton 法に比べはるかに少ない．

つぎに3次補間法から Newton 法への切り換えについて述べる．ζ が複素単根か，実の単根かによって3次補間法の収束の位数は，それぞれ2，4となる．前者の場合 Newton 法と同じ速さであり，後者の場合 Newton 法の反復2回をあらためて1回と数えることにより両者収束の位数は同じとなる．$\{z_n\}$ の収束過程において，3次補間法から Newton 法へ移行することによって，計算時間を少なくできる．問題は移行の時機である．そのため Newton 法の収束の条件を明らかにする必要がある．

定理 (Ostrowski) $f(z)$ は複素数値関数で

$f(z_0)/f'(z_0) \neq 0$, $h_0 = -f(z_0)/f'(z_0)$, $z_1 = z_0 + h_0$ とする．円 $K_0 = \{z;\ |z - z_1| \leq |h_0|\}$ を考え，K_0 において $f(z)$ は解析的で

$$\max_{z \in K_0} |f''(z)| = M, \qquad 2|h_0|M \leq |f'(z_0)|$$

とする．z_0 を初期値として

$$z_{\nu+1} = z_\nu - \frac{f(z_\nu)}{f'(z_\nu)}, \qquad \nu = 0, 1, 2, \cdots.$$

このとき各 $z_\nu \in K_0$ であって，K_0 における唯一の根 ζ に収束する．ζ が K_0 の境界上になければ，単根である．さらに次式が成り立つ．

$$\frac{|z_{\nu+1} - z_\nu|}{|z_\nu - z_{\nu-1}|} \leq \frac{M}{2|f'(z_\nu)|}, \qquad \nu = 1, 2, \cdots.$$

$$|\zeta - z_{\nu+1}| \leq \frac{M}{2|f'(z_\nu)|}|z_\nu - z_{\nu-1}|^2, \qquad \nu = 1, 2, \cdots.$$

われわれは $f(z)$ について，関数値と微係数しか知り得ない立場をとるので一般に定数 M を決定できない．しかし3次式 $g(z)$ に対しては，$g''(z)$ の限界を容易に求められる．すなわち

$$\max_{z \in K_0} |g''(z)| \leq 2|\gamma_1| + 6|\gamma_0|(y_0 + 2|h_0|).$$

したがって $g(z)$ に対しては右辺を定数 M にとれば十分である．

中心が実軸上にない円 K_0 を実軸が切るならば，z_0 に最も近い $g(z)$ の根が実根か複素根か Newton 反復(有限回)では判別できない．

以上のことから，点 $z_n = x_n + iy_n (y_n \geq 0)$ において $f(z)$ が

$$f'(z_n) \neq 0 \qquad (7\text{a})$$

$$2|h_n|M_n \leq |f'(z_n)|, \qquad (7\text{b})$$

$$\mathrm{Im}(z_n + h_n) > |h_n|, \qquad \mathrm{Im} z_n > 0 \qquad (7\text{c})$$

ただし　$h_n = -\dfrac{f(z_n)}{f'(z_n)}$

$$M_n = 2|\gamma_1| + 6|\gamma_0|(y_n + 2|h_n|)$$

をすべて満たすならば Newton 反復によって z_n を補正する．すなわち

$$z_{n+1} = \begin{cases} z_n + h_n, & \mathrm{Im}\ z_n > 0 \\ z_n + h_n - \dfrac{(\gamma_0 h_n + \gamma_1)h_n^2}{3\gamma_0 h_n^2 + 2\gamma_1 h_n + \gamma_2}, & \mathrm{Im}\ z_n = 0. \end{cases} \qquad (8)$$

条件が満たされなければ，高々3次式 $g(z) \neq$ 定数の根の中で，z_n に最も近い根だけを一つ求め，これを z_{n+1} とする．ここで $g(z)$ したがってその係数 γ_0 $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ は n に依存するが省略した．

z_n を初期値とし $g(z)$ に Newton 法が適用可能な限りこれを用いるので，上述の方法の大域的収束性は，3次補間法の収束性だけに支配される．

$g(z) \equiv$ 定数ならば，続行不能となるので，反復を停止するか，初期値を変えて再出発するかである．計算途中で，このようなことは経験上ほとんど起らない．

3.　実係数多項式への応用

n 次実係数多項式

$$f(z) = a_0 z^n + a_1 z^{n-1} + \cdots + a_{n-1} z + a_n, \qquad a_0 \neq 0 \qquad (9)$$

を4次式 $(z - z_0)^2 (z - \bar{z}_0)^2 = (z + pz + q)^2$ で割ったときの余りが点 $z_0, \bar{z}_0$ における $f(z)$ の3次 Hermite 補間式 $g(z)$ となる．$g(z)$ の計算法は Bairstow 法の場合と同じと考えてよい．

$$a_0 z^n + a_1 z^{n-1} + \cdots + a_n = (z^2 + pz + q)(b_0 z^{n-2} + b_1 z^{n-3} + \cdots + b_n) + b_{n-1}^*(z - x_0) + b_n^*$$

より

$$b_0 = a_0, \qquad b_1 = a_1 - pb_0,$$
$$b_{k+1} = a_{k+1} - pb_k - qb_{k-1}, \qquad k = 1, \cdots, n.$$
$$b_{n-1}^* = b_{n-1},$$
$$b_n^* = b_n - x_0 b_{n-1}. \qquad (10\text{a})$$

再び

$$b_0 z^{n-2} + b_1 z^{n-3} + \cdots + b_{n-2} = (z^2 + pz + q)(c_0 z^{n-4} + c_1 z^{n-5} + \cdots + c_{n-4}) + c_{n-3}^*(z - x_0) + c_{n-2}^*$$

より

$$c_0 = b_0, \qquad c_1 = b_1 - pc_0,$$
$$c_{k+1} = b_{k+1} - pc_k - qc_{k-1}, \qquad k = 1, \cdots, n-3,$$
$$c_{n-3}^* = c_{n-3},$$
$$c_{n-2}^* = c_{n-2} - x_0 c_{n-3}. \qquad (10\text{b})$$

これより $g(z)$ の係数は確定する．

$$g(z) = (z^2 + pz + q)(c_{n-3}(z - x_0) + c_{n-2}^*) + b^*_{n-1} \times (z - x_0) + b_n^* = (s^2 + y_0^2)(c_{n-3}^* s + c_{n-2}^*) + b_{n-1}^* s + b_n^*, \qquad z = x_0 + s. \qquad (11)$$

したがって

$$f(z_0) = g(z_0) = b_n^* + iy_0 b_{n-1}^*. \qquad (12\text{a})$$

$$f'(z_0) = g'(z_0) = b_{n-1}^* - 2y_0^2 c_{n-3}^* + 2iy_0 c_{n-2}^*. \qquad (12\text{b})$$

初期値のとり方について述べる．減次の過程における丸め誤差の影響を小さくするために絶対値の小さい根から求めたい．さらに3次補間法は実根に対して収束が速いので実根から求めたい．このような立場からまず $f(z)$ の低次の項の2次式 $a_{n-2}z^2 + a_{n-1}z + a_n = 0$ の二根を $\alpha, \beta (|\alpha| \leq |\beta|)$ 判別式を D とし

$$x_0 = \begin{cases} \alpha, & D \geq 0 \\ \dfrac{\alpha + \beta}{2}, & D < 0 \end{cases}$$

を求める．ただし $a_{n-2}=0$ ならば，絶対値の十分小さい実数で a_{n-2} を置き換える．つぎに $f(z)$ の根の分布，中心より幾分原点寄りの点（ここでは便宜上係数 1/2 をかけて）

$$x_0'=-a_1/2na_0$$

をとる．そして x_0 と x_0' のいずれか絶対値の小さい方を初期値 z_0 に採用する．

反復法の停止規則と 0 判定について述べる．2進法 t 桁浮動小数点演算を

$$fl(x \mathrm{R}\, y)=(x \mathrm{R}\, y)(1+\varepsilon), \qquad |\varepsilon|\leq 2^{-t}$$

あるいは $=(x \mathrm{R}\, y)/(1+\varepsilon)$

で表わす．Rは＋－×÷のいずれか一つである．ただし 2^{-2t} の項は無視する．任意の複素数 z の実部，虚部を丸めて $\tilde{z}$ で表わす．$f(z)$ の計算値の誤差限界を $\varepsilon_1=\varepsilon_1(\tilde{z})$ とすれば

$$|f(z)-f(z)\text{の計算値}|\leq\varepsilon_1(\tilde{z})+|z-\tilde{z}|\,|f'(z)|. \tag{13}$$

ただし $|z-\tilde{z}|\leq 2^{-t}|z|$.

$\varepsilon_1(z)$ は反復ごとに求める必要があるから，計算式は簡単で演算回数も少ないことが望ましい．2次式 z^2+pz+q の判別式が正にならないことから Adams の精密な評価式[4] が使える．これより僅かに粗いが，簡略化して

$$\varepsilon_1(z)=9\times 2^{-t}\sum_{k=0}^{n}|b_k|\,|z|^{n-k} \tag{14}$$

で $f(z)$ の計算誤差を評価すれば十分である．ここで加算器は倍精度で単精度に丸めると仮定する．加算器が単精度ならば定数9を 3/2 倍する[5]．(13) において第2項は第1項に比べ通常はるかに小さい．実際，

$$\sum_{k=0}^{n}|b_k|\,|z|^{n-k}\geq|z|^2|c_{n-2}^*+iyc_{n-3}^*|+|b_{n-1}z\\+|b_n|$$

より $\mathrm{Im}\, z=0$ ならば明らかに

$$\sum_{k=0}^{n}|b_k|\,|z|^{n-k}\geq|zf'(z)|+|b_n|+|z|^2\\\times|c_{n-2}^*+iyc_{n-3}^*|. \tag{15 a}$$

$\mathrm{Im}\, z\neq 0$ ならば

$$\sum_{k=0}^{n}|b_k|\,|z|^{n-k}\geq\frac{1}{2}\{|f(z)|+|zf'(z)|+|b_n|\}. \tag{15 b}$$

したがって

$$|b_n^*+iyb_{n-1}^*|\leq\varepsilon_1(z) \tag{16}$$

ならば反復を中止する．実用上は，なお一回反復して z_n を補正することが望ましい．

3次補間法によってつくられる $\{z_n\}$ は，つねに収束列になると断言できないので，一定回数（たとえば 50 回）反復しても上の収束の判定条件を満たさなければ反復を中止する．

$g(z)$ の見掛け上の最高べきの係数および微係数 $f'(z)$ の 0 判定を行なうためには，それらの計算値の誤差限界を求める必要がある．しかしこれは負担であるのですべて $f(z)$ の誤差限界を用い

$$|f'(z)|<\varepsilon_1(z), \qquad |\gamma_i|<\varepsilon_1(z), \qquad i=0,1,2 \tag{17}$$

ならば，それぞれを0とみなす．$g(z)$ の最高べきの有効桁数が小さければ，$g(z)=0$ を解いても効果は疑問だから，γ_0 だけは0判定を粗くすることも考えられる．

収束の判定を行なう際に $\sum|b_k|\,|z|^{n-k}$ を求めているので，これを用いて根 ζ の条件数を定義する．考え方は山下，佐竹に負う[6]．

$$\mathrm{cond}\,(\zeta)=\begin{cases}\displaystyle\sum_{k=0}^{n}|b_k|\,|\zeta|^{n-k}/|\zeta f'(\zeta)|, & \mathrm{Im}\,\zeta=0,\\ \displaystyle 2\sum_{k=0}^{n}|b_k|\,|\zeta|^{n-k}/|\zeta f'(\zeta)|, & \mathrm{Im}\,\zeta\neq 0.\end{cases} \tag{18}$$

ただし $\zeta f'(\zeta)\neq 0$ とする．

(15) より $\mathrm{cond}(\zeta)\geq 1$ が成り立つ．

誤差限界 (14) は，通常1～2桁（10進法）過大評価になっているので

$$\mathrm{cond}(\zeta)=\frac{f(\zeta)\text{の誤差限界}}{2^{-t}|\zeta f'(\zeta)|}\simeq 2^t\ \text{(根の相対誤差)}$$

と考えてよい．

一根 ζ を求めると $f(z)/(z-\zeta)$ により一次減次する．これに対して同様な操作をくり返えせば，ついには高高3次式となるので，これを直接解くことにより，すべての根が得られる．各近似根は，減次された多項式に対して条件 (16) を満たすので条件数 (18) が定義される．しかし与えられた多項式に対し，いま求めた近似根が (16) を満たすとは限らない．

本来，ζ を $f(z)$ の近似根というからには，ζ は $f(z)$ に対して (16) を満たさなければならない．このとき条件数の定義 (18) は意味をもつ，したがって前述の方法で，ひとまず得た各“近似根”が元の多項式に対して (16) を満たしているか確かめる必要がある．満たさなければ，適当に補正して満たすようにしたい．

そこで上述の“近似根“を初期値とする Newton

反復によって補正する．初期値 z_0 が $f(z)$ の根 ζ（重複度 $m\geq 1$）に十分近いとき

$$\frac{|f(z_{n+1})|}{|f(z_n)|}=O(|f(z_n)|), \qquad m=1$$
$$=\left(1-\frac{1}{m}\right)^m+O(\zeta-z_n), \qquad m\geq 2$$

が成り立つから，z_0 さえ適当にとれば

$$|f(z_{n+1})|<\frac{1}{2}|f(z)|, \qquad n=0,1,\cdots \tag{19}$$

としてよい．z_0 が Newton 法の収束条件を満たしていなければ，上式は必ずしも成立しない．z_0 が収束条件を満たしていても $f(z)$ の計算誤差の影響によって，$\{|f(z_n|)\}$ の単調性は，いつかは成り立たなくなる．したがってある番号 n において

$$|f(z_{n+1})|\geq\frac{1}{2}|f(z_n)| \tag{20}$$

ならば，Newton 反復を中止し，$f(z_{n+1})$ の誤差限界 $\varepsilon_1(z_{n+1})$ を求め，条件 (16) を z_{n+1} が満たすか確かめる．満たすならば，z_{n+1} を $f(z)$ の近似根 ζ として採用する．引続き条件数を求める．満たさなければ条件数は定義できない．2進法 t 桁演算では近似根を求め得ないことになる．したがって，このような場合高精度演算によって再計算する必要がある．実際，条件数が 2^t のオーダーとなると，微係数 $f'(z)$ の計算値は，ほとんど計算誤差ばかりとなるので，Newton(反復（t 桁演算）による補正は困難となる．

4. 数 値 例

多項式 $f(z)$ の根の条件数が総体的に大きい（小さい）とき $f(z)$ は状態がわるい（よい）という．

人為的であるが，状態のわるい問題とよい問題をつくり数値実験を試みた．

（a） 根が実軸上等差数列をなして分布する．

$$f(z)=\prod_{k=1}^{n}(z-k)$$

これは状態がわるい問題としてよく知られている．

（b） 実根が二つの等比数列

$$\rho^k(1\pm\sqrt{2}), \qquad k=0,1,\cdots,n/2$$

をなして分布する．すなわち n（偶数）次多項式

$$f(z)=\prod_{k=1}^{n/2}(z^2-2\rho^k z-\rho^{2k})$$

を用いる．ここでは $\rho=\sqrt{2}$ をとった．これは状態のよい問題である．

（c） 単位円の円弧上に等間隔に根が分布する．

$$e^{\pm i(2k/n)\alpha}, \qquad k=1,2,\cdots,n/2.$$

すなわち

$$f(z)=\prod_{k=1}^{n/2}\left(z^2-2\left(\cos\frac{2k}{n}\alpha\right)z=1\right).$$

正数 α が小さい程状態はわるくなる．また一定の α に対して n を大きくすると次第に状態はわるくなる．

ここでは $\alpha=\frac{3}{4}\pi$ にとった．

（d） 複素数 $\alpha_k+i\beta_k$, $k=1,2,\cdots$ の実部，虚部が $[-2, 2]$, $[0, 2]$ に分布する一様乱数であって，これより実係数多項式

$$f(z)=\prod_{k=1}^{n/2}(z^2-2\alpha_k z+\alpha_k^2+\beta_k^2)$$

をつくる．ただし $[0, 1]$ に分布する一様乱数を

$$x_{i+1}=23x_i \quad (\mathrm{mod}\ 10^8+1)$$

でつくり，一次変換によって $x_1, x_2, x_3, x_4, \cdots$ を $\alpha_1, \beta_1, \alpha_2, \beta_2, \cdots$ に対応させる．

これは総体的に状態のよい問題である．

(a), (b), (c), (d) における各 $f(z)$ の係数は倍長で計算し，単長に丸めた．これらの問題を文献 7) にあるプログラムによって解いた結果をまとめて示す．

表 2 計算時間 (Time, msec)

degree	(a)	(b)	(c)	(d)
10	22	13	22	14
20	77	44	59	53
30	143	88	122	84
40	218	143	225	131
50	337	209	303	203
60		289	358	304
70		382	481	433
80		483	601	530
100		over flow	841	904

NEAC-2200 model 700. Single precision.

表 3 平均反復回数 (Average number of iteration for one root)

degree	(a)	(b)	(c)	(d)
10	5.4(3.1)	3.4(1.0)	4.9(2.3)	3.3(1.3)
20	5.8(3.7)	3.6(1.3)	5.1(1.7)	4.6(1.7)
30	5.9(3.6)	3.9(1.5)	6.0(2.4)	4.2(1.1)
40	5.8(3.5)	3.9(1.5)	6.3(2.3)	3.9(1.2)
50	6.3(3.6)	3.8(1.5)	6.0(2.4)	4.2(1.4)
60		3.9(1.5)	5.4(1.8)	4.7(1.8)
70		4.0(1.6)	5.3(2.2)	5.1(1.9)
80		4.0(1.6)	5.4(2.0)	5.1(1.9)
100			5.0(2.1)	5.5(1.9)

Figure in ( ) shows the average number of solving the cubic equations.

表 4 最大反復回数 (Maximum number of iteration)

degree	(a)	(b)	(c)	(d)
10	6	4	13	7
20	12	4	15	19
30	16	4	28	12
40	15	4	33	12
50	18	4	24	12
60		4	23	17
70		5	19	25
80		5	26	24
100			17	24

表 5 最大の条件数 (Maximum condition number)

degree	(a)	(b)	(c)	(d)
10	5.83×10^{5}	4.51×10^{1}	5.36×10^{0}	1.97×10^{2}
20	1.31×10^{9}	1.76×10^{2}	7.55×10^{2}	2.23×10^{2}
30	1.91×10^{10}	2.51×10^{2}	2.25×10^{5}	1.73×10^{4}
40	2.63×10^{10}	2.75×10^{2}	8.86×10^{7}	2.21×10^{1}
50	1.62×10^{11}	2.87×10^{2}	8.16×10^{10}	1.83×10^{3}
60		2.98×10^{2}	2.26×10^{10}	1.96×10^{7}
70		3.08×10^{2}	2.27×10^{11}	1.25×10^{4}
80		3.18×10^{2}	9.90×10^{10}	9.73×10^{10}
100			1.20×10^{11}	*

* On some approximate roots, conditon number can not be defined for original polynomial.

これらの数値実験から次のことが結論づけられよう.

われわれの方法は理論的には局所的方法に属するが実験的には状態のわるい問題でも解けている.

計算時間は，ほぼ n^2 に比例する.

状態がわるければ，一根当りの平均反復回数と3次式を解く平均回数は増える傾向にある. したがって計算時間も同様な傾向を示す（表2，表3).

一定の n において最大所要時間と最小所要時間の比は，状態のよしあしに関係なく2を越すことはない. しかし最大反復回数は，状態のよしあしに著しく影響される（表4，表5). このことは，ここで述べた方法の大域的収束性について不安が残っていることを示すものである.

本研究の途中，反復法の停止規則で苦慮していたとき，戸川隼人先生より文献 4) を教えていただいた. これが効果的に働いていることを付言してお礼のことばにかえる.

参 考 文 献

1) Hitotumatu, S. : A Method of Sucessive Approximation Based on the Expansion of Second Order, Mathematica Japonicae, 7 (1962), pp. 31-50.
2) Ostrowski. A. M.: Solution of Equations and System of Equations, Academic Press, Inc., 2nd edition, 1966, p. vii and pp. 59-66.
3) 一松信：数値解析，税務経理協会，昭 46, pp. 140-143.
4) Adams, D. A.: A Stopping Criterion for Polynomial Root Finding, Technical, Report, CS 55, Stanford Univ. (1966).
5) Wilkinson, J. H.: Rounding Errors in Algebraic Processes, Her Majesty's Stationary Office, 1963, pp. 11-13.
6) 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，7 (1966) pp. 197-201.
7) 鳥居達生，都田艶子：3次エルミート補間法に基づく実係数代数方程式の解法，情報処理，14 (1973) pp. 288～289.

(昭和47年8月3日受付)