

ホモトピー法のパラメータに一次分数変換を適用した 近接根問題の解法について

鈴木秀男[†] 小林英恒^{††}

連立代数方程式が近接した根を持ち、それら近接した根の近接度が非常に強いとき、数値計算において、それら近接した根を分離し精度良く計算することは、一般に難しいことである。筆者らは、すでにこのような問題に対して、連立代数方程式の座標空間に一次分数変換を適用し、変換された方程式系を数値計算で解く方法を提案している。この論文では、一次分数変換をホモトピー法のパラメータに適用する方法について述べる。このとき、一次分数変換を適用したホモトピーは、形式的に新たなホモトピーとしても定義することができる。この新たなホモトピーによって、パラメータをより終値に近づけることができ、近接した根付近でのパスを正確に追跡することができる。そして、このような操作によって、パス追跡の精度を向上させることができ、結果として近接した根が分離され、精度良く計算される。

Calculation Method of Neighboring Roots by Homotopy Method with a Linear Fractional Transformation

HIDEO SUZUKI[†] and HIDETSUNE KOBAYASHI^{††}

We suppose that a system of algebraic equations have the roots located very close to each other. It is difficult to calculate with high accuracy and separate those roots. The authors have already suggested a method to apply the linear fractional transformation to coordinate space of a system of algebraic equations. In this paper, we present a method to apply the linear fractional transformation to a parameter of homotopy method. The homotopy with linear fractional transformation is formally defined as a new homotopy. And the parameter of this new homotopy is more close to terminal value (i.e. our method can improve precision of path tracing). As a result, we describe that neighboring roots are separated.

1. はじめに

連立代数方程式が近接した根を持つ場合に、それら近接した根を分離し精度良く計算することは、一般に難しいことである。筆者らは、このような近接した根を分離するために、連立代数方程式の座標空間に一次分数変換を適用し、変換された方程式系をホモトピー法による数値計算により解き、得られた数値解に逆の一次分数変換を適用してもとの座標空間へ戻す方法をすでに提案している^{1)~8),10),11)}。

文献1)~10),11)では、連立代数方程式を数値的に解くためにホモトピー法を採用している。ホモトピー

法は、連立代数方程式の根の近似値を統一的に計算する有力な手段であり、これまでに多くのホモトピー構成例が報告されている¹⁶⁾。それらのホモトピーを用い、筆者らは近接した根の分離を試みた結果、ある程度の近接した根を分離できることを多くの数値実験で確認している。しかし、それらの構成例は、パス追跡の効率化・安定化を主としており、近接度の強い問題に対しては精度良く分離することができない。

近接した根を分離するための1つの方法は、文献1)~8),10),11)で述べたような座標空間への一次分数変換の適用が有効である。一方、一次分数変換は、座標空間だけでなく、ホモトピー法のパラメータにも適用可能であるが、これまでにホモトピー法のパラメータに一次分数変換を適用し、近接根の分離を行う方法は報告されていない。そこで、この論文では、文献1)~8),10),11)で述べた一次分数変換をホモトピー法のパラメータに適用する方法について述べる。

ホモトピー法のパラメータに一次分数変換を適用す

[†] 職業能力開発総合大学校東京校情報技術科

Department of Information Technology, Institute of Tokyo, Polytechnic University

^{††} 日本大学理工学部数学科

Department of Mathematics, Faculty of Science and Technology, Nihon University

ることによって、パラメータをより終値に近づけることができる。このとき、一次分数変換を適用したホモトピーは、形式的に新たなホモトピーとしても定義することができる。そして、このような操作によって、パスを正確に追跡することができ、すなわちパス追跡の精度を向上させることができ、結果として近接した根が分離され精度良く計算される。なお、この論文の内容は、文献 12), 13) で述べた事項のうち、ホモトピー法のパラメータに一次分数変換を適用する部分で、紙面の都合上述べられなかった事項を追加し、さらに詳細部分を補足したものである。

2. ホモトピー法

連立代数方程式のすべての根を統一的に求める方法として、ホモトピー法が知られている。ホモトピー法の詳細については、文献 14)~16) を参照されたい。ここでは後で必要となる計算手法を中心にまとめておく。解くべき連立代数方程式をベクトル表記して

$$F(x) = 0 \quad (1)$$

と表すことにする。ここで、 $F: \mathbf{R}^N \rightarrow \mathbf{R}^N$ は連続写像である。このときホモトピー $H: \mathbf{R}^N \times \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}^N$ を

$$H(x, 1) = F(x), H(x, 0) = P(x)$$

を満たすように決める。ここで $P: \mathbf{R}^N \rightarrow \mathbf{R}^N$ は連続写像で、既知な根を持つとする。これまでに、各種のホモトピー構成例が提案されているが¹⁶⁾、ここでは筆者らの多くの数値実験の結果から近接した根の場合にも、比較的安定して数値解が得られる 2 次のホモトピーを採用する。したがって、具体的なホモトピーの形として

$$H(x, t) = tF(x) + (1-t)P(x) + t(1-t)\tilde{P}(x) \quad (2)$$

を採用することにする。ここで $\tilde{P}: \mathbf{R}^N \rightarrow \mathbf{R}^N$ は連続写像であり、 $\tilde{P} \equiv 0$ ならば t に関して 1 次のホモトピーとなり、 $\tilde{P} \neq 0$ ならば t に関して 2 次のホモトピーとなる。また、 F, P, \tilde{P} が連続写像であることより H も連続写像である。ホモトピー H に関して次の仮定を置く。

[仮定 1]

$H: \mathbf{R}^N \times \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}^N$ は連続微分可能な写像とする。

[仮定 2]

$u_0 \in \mathbf{R}^N \times \mathbf{R}$ に対し $H(u_0) = 0$ であり、ヤコビ行列 $H'(u_0)$ は $\text{rank}(H'(u_0)) = N$ を満たす。

このとき $H(x, t) = 0$ は、 $\mathbf{R}^N \times \mathbf{R}$ の中の曲線群を表し、曲線上の点は適当なパラメータを使って表示することができる。そこでパラメータの値が弧長になるように選ぶとき、パス追跡に関して次の命題が成り

立つ。証明は文献 16) を参照されたい。

命題 2.1 パラメータ θ を 0 を含むようなある区間 $J \subset \mathbf{R}$ で定義された連続微分可能な曲線 $\varphi: J \rightarrow \mathbf{R}^N \times \mathbf{R}$ の弧長とし、 $\varphi(0) = u_0, H(\varphi(\theta)) = 0$ が成り立つものとする。このとき $\theta \in J$ に対し $\dot{\varphi}(\theta)$ は以下の 3 条件を満たす。

$$(1) \quad H'(\varphi(\theta))\dot{\varphi}(\theta) = 0$$

$$(2) \quad \|\dot{\varphi}(\theta)\| = 1$$

$$(3) \quad \det \begin{pmatrix} H'(\varphi(\theta)) \\ \dot{\varphi}^T(\theta) \end{pmatrix} > 0, \quad \text{ここで } \dot{\varphi}^T(\theta) \text{ は、} \\ \dot{\varphi}(\theta) \text{ の転置とする。}$$

仮定 1, 2 のもとで $P(\xi) = 0$ を満たす $\xi \in \mathbf{R}^N$ を用い、 $u_0 = (\xi, 0)$ として命題 2.1 によりパス $\varphi(\theta)$ を追跡すれば、 $t = 1$ に対応する $\theta_1 \in J$ における $\varphi(\theta_1) = (\zeta, 1)$ を満たす $\zeta \in \mathbf{R}^N$ が $H(\zeta, 1) = F(\zeta) = 0$ を満たす。このようにして、 $F(x) = 0$ の 1 つの根 $x = \zeta$ が求められることになる。

この命題を満たすパスを追跡する方法にも、各種の方法があるが^{14)~16)}、ここでは、微分方程式を導いた後に、高次の予測子 - 修正子法¹⁸⁾を適用してパスを追跡し、必要に応じてニュートン法により精度を向上させる方法を用いている。

3. 近接根分離と近接根領域の決め方

3.1 近接根分離と近接根領域の定義

近接根を含む連立代数方程式が

$$f_1(x) = 0, \dots, f_n(x) = 0 \quad (3)$$

のように与えられたとする。ただし、 $x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbf{C}^n$, $f_i \in \mathbf{C}[x_1, \dots, x_n]$, $m_i = \deg f_i$ とする。

ある点 $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n) \in \mathbf{C}^n$ を固定したとき、十分小さな $\epsilon > 0$ に対して、式 (3) の根の中で $\lambda_j (j = 1, \dots, r)$ が領域 $R = \{z | z \in \mathbf{C}^n, \|z - \alpha\| < \epsilon\}$ に含まれるとき、これらの根 $\lambda_j (j = 1, \dots, r)$ を (近接度 ϵ) の近接根と呼ぶ。そして、このような近接根を分離して精度良く計算することを近接根分離問題と呼ぶ。

近接根分離問題の解法として、文献 11) では、座標空間への一次分数変換を利用している。次節では、文献 11) で記述されている理論と同様の一次分数変換と近接根領域を使用して理論を展開するため、文献 11) で述べられている議論の中から次節以降で必要となる部分を、その結果のみ取り出し以下にまとめておく。詳細は、文献 11) を参照されたい。また、一般的な一次分数変換については文献 17) を参照されたい。

(1) 近接根分離のための近接根の領域は、各座標成

分ごとに近接度が定義され

$$W = W(\alpha_1; \epsilon_1) \times \cdots \times W(\alpha_n; \epsilon_n) \quad (4)$$

$$W(\alpha_j; \epsilon_j) = \{z \in \mathbb{C} \mid |z - \alpha_j| < \epsilon_j\}$$

と表現されているものとする。ただし、 $\epsilon_j (j = 1, \dots, n) > 0$ は十分小さいものとする。

- (2) アフィン空間 \mathbb{C}^n での実際の一次分数変換による座標の対応は、 $(x_1, \dots, x_n) \rightarrow (u_1, \dots, u_n)$ であり、点 $x = (x_1, \dots, x_n)$ は

$$u_j = \frac{x_j - \alpha_j}{\sum_{l \in I} (x_l - \alpha_l + \gamma_l)} \quad (5)$$

を座標成分に持つ点 $u = (u_1, \dots, u_n)$ へ変換される。一方、 $(u_1, \dots, u_n) \rightarrow (x_1, \dots, x_n)$ への変換には

$$x_i = \frac{\sum_{j \in I} \gamma_j u_j - \left(\sum_{j \in I} u_j - 1 \right) \alpha_i}{1 - \sum_{j \in I} u_j} \quad (6)$$

を利用する。

ここで、 I は要素として $1, \dots, n$ までの整数を少なくとも 1 つ以上含む添字の集合として構成され、 γ_j は $\gamma_j = k_j \epsilon_j$ ($k_j \geq 1$ は近接根領域の拡大率に関する定数) である。

3.2 近接根領域の決め方

与えられた連立代数方程式から事前に近接根が存在している領域を厳密に知る一般的な方法は存在しない。そこで、筆者らは、次の 2 つの方法を利用して近接根の存在している領域を特定している。

- (1) 重複度の挟み込み計算の手法を利用

筆者らは、文献 9) などで連立代数方程式の根の重複度を数値的に計算する方法を考案している。しかも、真の重複度 (整数値) を数値計算によって 2 つの浮動小数点数で挟み込むことが可能となり信頼性を持って重複度が計算される手法である。

この手法は、通常ホモトピー法で全根の近似値を計算して、計算された近似値に対して個別に適用されるため、全根の重複度を得ることができるものである。この結果において、もし重複度が 1 でないものが集中して存在する領域があれば、それらは近接根または重根である。そこで、それらの近似解の重心と重心からの最大距離を分離領域の候補とし、座標空間へ一次分数変換を適用して近接根の分離を試みる。得られた近似解に対して重複度の挟み込み計算を適

用しても重複度が 2 以上であればもとの根は重根であり、そうでなければ近接根と判断して重心と最大距離をもとに、重心を近接根領域の中心とし、最大距離を近接度とする近接根領域を決定する。

文献 9) では、1 度の計算で重根 (または近接根) の重複度 (または近接度) が区別なく計算されることを述べているが、実際には、近接根領域の信頼性を高めるために 2 度適用している。なお、重心と重心からの最大距離を利用して近接根領域を決定する手法は、すでに、文献 5), 11) でも採用している方法である。しかし、より簡潔な方法として次のような直接的な方法もある。

- (2) ホモトピー法により得られた近似解を直接利用^{5), 11)}

上記の方法よりも簡略した方法を使用することもできる。その方法は、通常ホモトピー法を適用した結果の近似解と、あらかじめ与えられた十分小さい判定基準値を利用する。ある近似解を中心とし、判定基準値内に複数の近似解があれば、それらを近接根と見なし、各近似解の重心を近接根領域の中心とし、そこからのずれを各近似解に対して計算し、その中から最も大きい値を近接度として近接根領域を決める方法である^{5), 11)}。

このようにして、単根ではなく近接根領域が決定されると、この時点で高精度計算が必要と判断して、次章以降で述べる座標空間やホモトピーパラメータへの一次分数変換の適用を考える。

なお、上記の方法で近接根領域が決定されると、近接根を適当な座標変換で原点周りへ移動できるので、この論文では近接根領域の中心を原点にとっている。

4. ホモトピー法への一次分数変換の適用

一次分数変換は、ある点の近傍を拡大し、それ以外の点を特定の超平面へ近づけるという性質がある。すでに、筆者らは座標空間に対して一次分数変換を適用して近接根を分離し、それにともなう擬局所化について論じてきた^{1)~8), 10), 11)}。ここでは、ホモトピー法のパラメータに直接に一次分数変換を適用することを試みる。座標空間への一次分数変換とパラメータへの一次分数変換は、同時に適用することが可能であり、以下の議論では、座標空間に一次分数変換を適用し近接根付近を拡大した後に引き続きパラメータへも一次分数変換を適用するものとして述べる。

分離したい近接根領域が式 (4) のように与えられているものとし, 一次分数変換 (6) によって式 (3) を変換した結果の連立代数方程式を次のように表す.

$$g_1(u) = 0, \dots, g_n(u) = 0 \tag{7}$$

ただし, $u = (u_1, \dots, u_n) \in \mathbb{C}^n$, $g_i \in \mathbb{C}[u_1, \dots, u_n]$ である. この連立代数方程式を解くために式 (2) のような 2 次のホモトピーを採用する. すなわち式 (7) の $g_j(u)$ ($j = 1, \dots, n$) から

$$h_j(u, t) = tg_j(u) + (1-t)p_j(u) + t(1-t)\tilde{p}_j(u) \tag{8}$$

$(j = 1, \dots, n)$

を構成する. ここで, $p_j(u) = 0$ は既知な根を持つ (または簡単に根が計算できる) 代数方程式であり, ここでは

$$p_1(u_1, \dots, u_n) = u_1^{m_1} - \mu_1, \dots, p_n(u_1, \dots, u_n) = u_n^{m_n} - \mu_n \quad (\mu_i \in \mathbb{C})$$

という形の多項式を採用する¹⁶⁾. また, $\tilde{p}_j(u_1, \dots, u_n) = \mu_j u_j^{m_j}$ ($\mu_j \in \mathbb{C}$) である.

実際の計算では, \mathbb{C} と \mathbb{R}^2 を同一視し, $u_j = v_{2j-1} + iv_{2j}$ ($j = 1, \dots, n$) として, $u = (u_1, \dots, u_n) \in \mathbb{C}^n \rightarrow v = (v_1, v_2, \dots, v_{2n-1}, v_{2n}) \in \mathbb{R}^{2n}$ なる座標の対応を考え, \mathbb{C}^n と \mathbb{R}^{2n} を同一視し, g_j, p_j, \tilde{p}_j ($j = 1, \dots, n$) を \mathbb{R}^{2n} で考えることにより,

$$g_j(u) = G_{2j-1}(v) + iG_{2j}(v)$$

$$p_j(u) = P_{2j-1}(v) + iP_{2j}(v)$$

$$\tilde{p}_j(u) = \tilde{P}_{2j-1}(v) + i\tilde{P}_{2j}(v)$$

と表現し, 式 (8) を

$$h_j(u, t) = H_{2j-1}(v, t) + iH_{2j}(v, t)$$

のように表し, $H_j(v, t)$ をまとめて $H(v, t) = (H_1(v, t), \dots, H_{2n}(v, t))$ とベクトル表現すれば

$$H(v, t) = tG(v) + (1-t)P(v) + t(1-t)\tilde{P}(v) \tag{9}$$

となる. ここで, $G(v) = (G_1(v), \dots, G_{2n}(v))$, $P(v) = (P_1(v), \dots, P_{2n}(v))$, $\tilde{P}(v) = (\tilde{P}_1(v), \dots, \tilde{P}_{2n}(v))$ である.

そして, $p_j(u_1, \dots, u_n) = 0$ ($j = 1, \dots, n$) を満たす根を対応する \mathbb{R}^{2n} の $t = 0$ における点と考えて 2 章で述べた方法により $H(v, t) = 0$ を満たすパスを追跡し, $t = 1$ に対応する \mathbb{R}^{2n} の点を \mathbb{C}^n に戻したものがもとの問題 (式 (7)) の根となる.

式 (7) から得られるホモトピーの式 (9) に対して, パスの追跡精度を向上させるために, ホモトピーパラメータ t に一次分数変換を適用する. そのため, 座標の対応を $t \rightarrow s$ とする一次分数変換を $s = \psi(t) = (a_{11}t + a_{10}) / (a_{01}t + a_{00})$ で表す. t は, $t \in [0, 1]$ で定義されているため $\psi(0) = 0, \psi(1) = 1$ を満たす形の一次分数変換を考える.

この条件を満たす一次分数変換は, 様々なものが考

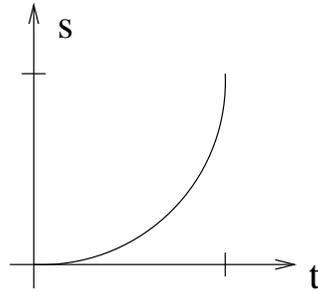


図 1 ホモトピーパラメータの変換
Fig. 1 Transformation of homotopy parameter.

えられるが, ここでは, 十分小さな正の数 δ に対し, $\psi(0) = 0, \psi(1) = 1, \psi(\infty) = -\delta$ を満たすものを採用する. この条件を満たす一次分数変換は,

$$\psi(t) = \frac{\delta t}{1-t+\delta}$$

となり, パラメータ t, s の対応として

$$s = \frac{\delta t}{1-t+\delta}, t = \frac{(1+\delta)s}{s+\delta} \tag{10}$$

を得る. このときのホモトピーパラメータの変換の様子を図示すると, 概略として図 1 のようになる. 図 1 より, 式 (10) の変換は, もとのパラメータ t に比べて, 変換されたパラメータ s は, 非線形的にパラメータの進行を遅らせることが分かる. このことから, パラメータの終値付近での遅れを利用することにより, 変換されたパラメータ s よりも, もとのパラメータ t を終値に近づけることが可能となる. たとえば, もとの空間でのパラメータ t が $1-t = 1.0 \times 10^{-14}$ であれば, このような変換によって新たなパラメータ s は, $\delta = 0.001$ のときにほぼ $1-s = 1.0 \times 10^{-11}$ となる. 逆にいうと, 変換された問題においてパラメータ s の追跡を $1-s = 1.0 \times 10^{-11}$ で終了すれば, それはもとの問題におけるパラメータ t では $1-t = 1.0 \times 10^{-14}$ までパスを追跡したことになる. パスをどれだけ 1 へ近づけることができるのか, その量のことを分解能と呼ぶ. すなわち, 分解能が高くなればパスをより細部まで追跡できることを表している.

式 (10) のような一次分数変換により, ホモトピー $H_j(v, t)$ を変換し, $1/(s+\delta)^2$ でくくったものを $\tilde{H}_j(v, s, \delta)$ で表せば

$$\begin{aligned} \tilde{H}_j(v, s, \delta) = & (s+\delta)(1+\delta)sG_j(v) \\ & + \delta(s+\delta)(1-s)P_j(v) \\ & + \delta(1+\delta)(1-s)s\tilde{P}_j(v) \end{aligned}$$

$(j = 1, \dots, 2n)$

を得る. これらをまとめてベクトル表現すれば

$$\tilde{H}(v, s, \delta) = (s+\delta)(1+\delta)sG(v)$$

$$\begin{aligned}
 & +\delta(s+\delta)(1-s)P(v) \\
 & +\delta(1+\delta)(1-s)s\tilde{P}(v) \quad (11)
 \end{aligned}$$

$$\tilde{H}(v, 0, \delta) = \delta^2 P(v)$$

$$\tilde{H}(v, 1, \delta) = (1+\delta)^2 G(v)$$

となり、 $s = 0$ および $s = 1$ のときの $\tilde{H}(v, s, \delta) = 0$ の根は、それぞれ $P(v) = 0, G(v) = 0$ の根と一致する。一般的に

$$\begin{aligned}
 \tilde{H}_j \in \mathbf{R}[v_1, \dots, v_{2n}, \delta, s], \delta \in \mathbf{R}, s \in [0, 1], \\
 (v_1, \dots, v_{2n}) \in \mathbf{R}^{2n}
 \end{aligned}$$

より $\tilde{H} = 0$ は $\mathbf{R}^{2n} \times \mathbf{R} \times [0, 1] \subset \mathbf{R}^{2n+2}$ 内の曲線群を表す。

これは形式的には、新たなホモトピーを与え、パラメータ t を s に置き換えたホモトピーの第 1 項 (s の部分) に $(s+\delta)(1+\delta)$ を、第 2 項 ($1-s$ の部分) に $\delta(s+\delta)$ を、第 3 項 ($(1-s)s$ の部分) に $\delta(1+\delta)$ を掛けた形となる。

次に、 δ を固定したときの 2 つのホモトピー H, \tilde{H} との関係について考察する。これにより、一次分数変換による効果を確認できる。

はじめに、2 つのホモトピー H, \tilde{H} のパラメータ t, s の 1 付近での関係を調べると次の命題が成り立つ。

命題 4.1 $\Delta t = 1 - t, \Delta s = 1 - s, \delta > 0$ を十分小さな正の数とするとき

$$\Delta t = \delta \Delta s (1 + O((\delta - \Delta s)))$$

が成り立つ。

[証明] 一般に式 (10) から

$$\begin{aligned}
 \Delta t = 1 - t &= \frac{\delta - \delta s}{s + \delta} = \frac{\delta \Delta s}{1 - \Delta s + \delta} \\
 &= \frac{\delta}{1 + \delta - \Delta s} \Delta s
 \end{aligned}$$

という関係式が成り立ち、 $\delta, \Delta s$ が十分小さいことより

$$\Delta t = \frac{\delta}{1 + \delta - \Delta s} \Delta s = \delta \Delta s (1 - (\delta - \Delta s) + \dots)$$

を得る。 ■

一次分数変換は、ホモトピーパラメータのみに適用しているため、次の命題は簡単な計算により得られる。

命題 4.2 $\forall t' \in [0, 1]$ に対し、 $\tilde{\alpha} \in \mathbf{R}^{2n}$ が $H(\tilde{\alpha}, t') = 0$ を満たすならば、 $\tilde{H}(\tilde{\alpha}, \psi(t'), \delta) = 0$ である。同様に、 $\forall s' \in [0, 1]$ に対し、 $\tilde{\alpha} \in \mathbf{R}^{2n}$ が $\tilde{H}(\tilde{\alpha}, s', \delta) = 0$ を満たすならば、 $H(\tilde{\alpha}, \psi^{-1}(s')) = 0$ である。

[証明] 前半部分のみ、示しておく。もし、 $t' = 1$ であれば、式 (9) より $G(\tilde{\alpha}) = 0$ であり、 $\psi(1) = 1$ であるから $\tilde{H}(\tilde{\alpha}, \psi(t'), \delta) = 0$ が得られる。

もし、 $\forall t' \in [0, 1)$ であれば、 $\tilde{H}(\tilde{\alpha}, \psi(t'), \delta)$ を直接

計算することにより、

$$\tilde{H}(\tilde{\alpha}, \psi(t'), \delta) = \frac{\delta^2(1+\delta)^2}{(1-t'+\delta)^2} H(\tilde{\alpha}, t')$$

が成り立つことが分かり、これより結論を得る。 ■

ゆえに、十分小さな $\Delta s > 0, \delta > 0$ に対し、 $\tilde{\alpha} \in \mathbf{R}^{2n}$ が $\tilde{H}(\tilde{\alpha}, 1 - \Delta s, \delta) = 0$ を満たすとき $\tilde{\alpha}$ は、 $H(\tilde{\alpha}, 1 - \delta \Delta s) = 0$ を満たすと考えてよい。

ホモトピーパスは、空間曲線となり命題 2.1 で述べたように、パスの弧長 θ をパラメータとして、適当な区間 $J \subset \mathbf{R}$ において

$$H(v(\theta), t(\theta)) = 0 \quad \theta \in J \subset \mathbf{R} \quad (12)$$

$$\tilde{H}(v(\theta), s(\theta), \delta) = 0 \quad \theta \in \tilde{J} \subset \mathbf{R} \quad (13)$$

と表現される。このようなパラメータ表現されたホモトピーに関して、次の命題が成り立つ。

命題 4.3 ホモトピーパスが、その弧長 θ をパラメータとして式 (12), (13) のように表現されており、ある $\theta_1 \in J, \theta_2 \in \tilde{J}$ に関して

$$H(v(\theta_1), t(\theta_1)) = H(\alpha^*, 1) = 0 \quad (14)$$

$$\tilde{H}(v(\theta_2), s(\theta_2), \delta) = \tilde{H}(\alpha^*, 1, \delta) = 0 \quad (15)$$

を満たし、すなわち α^* は $G(v) = 0$ の根の 1 つであり、 H, \tilde{H} に対し

$$\det \frac{\partial H}{\partial v}(\alpha^*, 1) \neq 0, \det \frac{\partial \tilde{H}}{\partial v}(\alpha^*, 1, \delta) \neq 0 \quad (16)$$

が成り立つものとする。さらに、 $(\alpha^*, 1)$ の近傍での曲線の様子を調べるため、十分小さな $\Delta \theta_1 > 0, \Delta \theta_2 > 0$ に対して

$$H(v(\theta_1 - \Delta \theta_1), t(\theta_1 - \Delta \theta_1)) = 0 \quad (17)$$

$$\tilde{H}(v(\theta_2 - \Delta \theta_2), s(\theta_2 - \Delta \theta_2)) = 0 \quad (18)$$

$$t(\theta_1 - \Delta \theta_1) = s(\theta_2 - \Delta \theta_2) \quad (19)$$

が成立しているものとする。

このとき

$$\Delta \tilde{\alpha} = \|v(\theta_2 - \Delta \theta_2) - \alpha^*\|$$

$$\Delta \hat{\alpha} = \|v(\theta_1 - \Delta \theta_1) - \alpha^*\|$$

とすれば

$$\Delta \tilde{\alpha} \approx \delta \Delta \hat{\alpha}$$

が成り立つ。ここで、記号 \approx は、 $A \approx B$ のとき A と B が近似的に等しいことを意味する (以下、この論文を通して同様)。

[証明] 式 (17), (18), (19) に現れる $v(\theta_1 - \Delta \theta_1), t(\theta_1 - \Delta \theta_1), v(\theta_2 - \Delta \theta_2), s(\theta_2 - \Delta \theta_2)$ を、それぞれ

$$v(\theta_1 - \Delta \theta_1) = v(\theta_1) + \xi_1(-\Delta \theta_1)$$

$$\xi_1 = (\dot{v}_1(\xi_1^{(1)}), \dots, \dot{v}_{2n}(\xi_1^{(2n)}))$$

$$\xi_1^{(i)} \in [\theta_1 - \Delta \theta_1, \theta_1]$$

$$i = 1, \dots, 2n$$

$$t(\theta_1 - \Delta \theta_1) = t(\theta_1) + \dot{t}(\eta_1)(-\Delta \theta_1)$$

$$\eta_1 \in [\theta_1 - \Delta \theta_1, \theta_1]$$

$$\begin{aligned} v(\theta_2 - \Delta\theta_2) &= v(\theta_2) + \xi_2(-\Delta\theta_2) \\ \xi_2 &= (\dot{v}_1(\xi_2^{(1)}), \dots, \dot{v}_{2n}(\xi_2^{(2n)})) \\ \xi_2^{(i)} &\in [\theta_1 - \Delta\theta_1, \theta_1] \\ i &= 1, \dots, 2n \\ s(\theta_2 - \Delta\theta_2) &= s(\theta_2) + \dot{s}(\eta_2)(-\Delta\theta_2) \\ \eta_2 &\in [\theta_2 - \Delta\theta_2, \theta_2] \end{aligned}$$

のように級数展開する。ここで、 $\dot{v}_j = dv_j/d\theta$ 、 $\dot{t} = dt/d\theta$ 、 $\dot{s} = ds/d\theta$ である。

これらを式 (17), (18) に代入し、それぞれ $v(\theta_1)$, $t(\theta_1)$, $v(\theta_2)$, $s(\theta_2)$ を中心に展開すれば

$$\begin{aligned} &H(v(\theta_1 - \Delta\theta_1), t(\theta_1 - \Delta\theta_1)) \\ &= H(v(\theta_1), t(\theta_1)) \\ &+ H_v(v(\theta_1), t(\theta_1))\xi_1(-\Delta\theta_1) \\ &+ H_t(v(\theta_1), t(\theta_1))\dot{t}(\eta_1)(-\Delta\theta_1) \\ &+ \dots \end{aligned} \tag{20}$$

$$\begin{aligned} &\tilde{H}(v(\theta_2 - \Delta\theta_2), s(\theta_2 - \Delta\theta_2), \delta) \\ &= \tilde{H}(v(\theta_2), s(\theta_2), \delta) \\ &+ \tilde{H}_v(v(\theta_2), s(\theta_2), \delta)\xi_2(-\Delta\theta_2) \\ &+ \tilde{H}_s(v(\theta_2), s(\theta_2), \delta)\dot{s}(\eta_2)(-\Delta\theta_2) \\ &+ \dots \end{aligned} \tag{21}$$

となる。ただし、 H_v , H_t , \tilde{H}_v , \tilde{H}_s は、それぞれ

$$H_v = \frac{\partial H}{\partial v}, H_t = \frac{\partial H}{\partial t}, \tilde{H}_v = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial v}, \tilde{H}_s = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial s}$$

を意味している。ここで、式 (20), (21) は仮定の式 (17), (18) よりともにゼロベクトルであり、右辺の第 1 項も式 (14), (15) よりともにゼロベクトルとなる。ゆえに、 $\Delta\theta_1 > 0$, $\Delta\theta_2 > 0$ が十分小さいことから高次の項を省略して

$$\begin{aligned} &H_v(v(\theta_1), t(\theta_1))\xi_1(-\Delta\theta_1) \\ &+ H_t(v(\theta_1), t(\theta_1))\dot{t}(\eta_1)(-\Delta\theta_1) = 0 \\ &\tilde{H}_v(v(\theta_2), s(\theta_2), \delta)\xi_2(-\Delta\theta_2) \\ &+ \tilde{H}_s(v(\theta_2), s(\theta_2), \delta)\dot{s}(\eta_2)(-\Delta\theta_2) = 0 \end{aligned}$$

を得る。さらに

$$\begin{aligned} \tilde{H}_v(v(\theta_2), s(\theta_2), \delta) &= (1 + \delta)^2 H_v(v(\theta_1), t(\theta_1)) \\ \tilde{H}_s(v(\theta_2), s(\theta_2), \delta) &= \delta(1 + \delta) H_t(v(\theta_1), t(\theta_1)) \end{aligned}$$

であることと、式 (16) より \tilde{H}_v^{-1} , H_v^{-1} が存在すること、および $t(\theta_1 - \Delta\theta_1)$, $s(\theta_2 - \Delta\theta_2)$ を級数展開した式において $t(\theta_1) = s(\theta_2) = 1$ と式 (19) から $\dot{s}(\eta_2)(-\Delta\theta_2) = \dot{t}(\eta_1)(-\Delta\theta_1)$ が得られることより

$$\begin{aligned} \Delta\tilde{\alpha} &= \|v(\theta_2 - \Delta\theta_2) - \alpha^*\| = \|\xi_2(-\Delta\theta_2)\| \\ &= \|\tilde{H}_v^{-1}(\alpha^*, 1, \delta)\tilde{H}_s(\alpha^*, 1, \delta)\dot{s}(\eta_2)(-\Delta\theta_2)\| \\ &= \left\| \frac{1}{(1 + \delta)^2} H_v^{-1}(\alpha^*, 1)\delta(1 + \delta)H_t(\alpha^*, 1) \right. \\ &\quad \left. \dot{t}(\eta_1)(-\Delta\theta_1) \right\| \\ &= \frac{\delta}{1 + \delta} \|H_v^{-1}(\alpha^*, 1)H_t(\alpha^*, 1)\dot{t}(\eta_1) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &(-\Delta\theta_1)\| \\ &= \frac{\delta}{1 + \delta} \|\xi_1(-\Delta\theta_1)\| \\ &= \frac{\delta}{1 + \delta} \|v(\theta_1 - \Delta\theta_1) - \alpha^*\| \\ &= \frac{\delta}{1 + \delta} \Delta\hat{\alpha} \end{aligned}$$

を得る。 $\delta > 0$ が十分小さいことより $\delta/(1 + \delta) \approx \delta$ が成立し、これを上式に代入することにより

$$\Delta\tilde{\alpha} \approx \delta\Delta\hat{\alpha}$$

となる。

命題 4.3 より

$$H(\hat{\alpha}, t') = 0$$

$$\tilde{H}(\hat{\alpha}, s', \delta) = 0$$

においてホモトピーパラメータ t' , s' が 1 に十分近く、 $t' = s'$ のように t, s が同じ精度で求められているならば、一次分数変換を適用した方が変数 v の座標値の根からのずれは δ 倍小さくなる。

また、命題 4.1, 4.2 は、変換された空間でパラメータ s の値が 1 に十分近く、すなわち Δs が十分小さければ、そのときの v の値はもとの空間では、パラメータ t が $\delta\Delta s$ だけより 1 へ近づいたときの値を意味している。

したがって、もとの空間でいえば、ホモトピーパラメータ t の追跡精度が計算桁数以上の分解能を持つ精度で 1 へ近づいたことを表している。

これにより、 $t \approx 1$ の近くでの振舞いがより正確に把握でき、近接根や単根の場合に数値的な安定性と計算精度の信頼性を向上させることができる。

ここで δ の決定法について簡単に述べておく。ホモトピーパラメータへの一次分数変換の適用において、命題 4.1 が成り立つ。したがって、追跡したいホモトピーパラメータの精度 $\Delta t = |1 - t|$ が与えられたとき

$$\delta\Delta s = \Delta t \tag{22}$$

を満たすようにパラメータ δ を決めることにする。

また、座標空間へ一次分数変換を適用した方程式系は、減次を適用することも可能である¹¹⁾。減次を適用した方程式系をホモトピー法で解く場合にも、ホモトピーパラメータへの一次分数変換は適用可能である。本論文では、文献 11) と同じ形式の近接根領域と一次分数変換を利用しているため、単に、上記の議論の中の $G(v)$ を減次された方程式系で置き換えるだけでよい。

次章では、以上の理論を取り入れたホモトピー法の数値例を示す。実際の計算は、数式処理と数値計算のハイブリッド計算として実現している。すなわち、与えられた連立代数方程式は、はじめに数式処理上で入

表 1 ホモトピー法の計算結果(上段: Case1, 下段: Case3)

Table 1 The results of the calculation of the homotopy method (Above: Case1, Below: Case3).

No.	数値解	$\Delta t, \Delta s$
1	(0.9901105452243354e-02, 0.3602038871632662e-06)	0.12e-13
	(0.9900990100170386e-02, 0.3495237769460635e-11)	0.12e-13
2	(0.9997641536548656e-02, -0.9802040798317101e-02)	0.29e-13
	(0.9998039596064615e-02, -0.9801999608345817e-02)	0.29e-13
3	(0.1970200808417726e-01, 0.9610680999219587e-02)	0.10e-13
	(0.1970206631368536e-01, 0.9610764054879114e-02)	0.10e-13
4	(0.9998183014334596e-02, 0.9801867608778251e-02)	0.14e-13
	(0.9998039601523191e-02, 0.9801999606593496e-02)	0.14e-13
5	(0.1970204520013679e-01, -0.9611369947187651e-02)	0.60e-13
	(0.1970206631404729e-01, -0.9610764061797965e-02)	0.60e-13

力され、座標空間やホモトピーパラメータへの一次分数変換などの代数的変換を得て、数値計算のための関数を作成する。作成された関数を使い、数式処理から数値計算のための手続きを呼ぶ。数値計算部分では、任意多倍長計算は行わず倍精度実数(8バイト)で計算をしている。そして、数値計算によるパス追跡の結果、得られた近似解を再び数式処理に受け取り、もとの問題の近似解へ変換するため逆の一次分数変換などの演算を行うようにしている^{5),9),11)}。

また、一次分数変換の適用は、その適用の方法により次の4通りに分類される。

Case0). 適用なし、すなわち通常ホモトピー法のみ、

Case1). 座標空間のみ一次分数変換を適用、

Case2). ホモトピーパラメータのみ一次分数変換を適用、

Case3). 座標空間とホモトピーパラメータ両方に一次分数変換を適用。

5. 数 値 例

問題 5.1 次の1変数代数方程式を考える。

$$\begin{aligned}
 f(x) = & x^6 - 1.000000007 \times 10^2 x^5 \\
 & + 0.7000000021 \times 10^{-4} x^4 \\
 & - 0.21000000033 \times 10^{-10} x^3 \\
 & + 0.33000000028 \times 10^{-17} x^2 \\
 & - 0.2800000001 \times 10^{-24} x \\
 & + 1.0 \times 10^{-32} = 0
 \end{aligned}$$

この問題は5つの近接根を持ち、それらは

$$\begin{aligned}
 & 0.0000001, 0.0000001 \pm 0.0000001i, \\
 & 0.0000002 \pm 0.0000001i
 \end{aligned}$$

であるが、この方程式を Case0 の方法で解くと、得られた近似解の精度によっては、近接根が分離されず紛れることがある。その場合でも、近接根が原点周りのおおよそ 1.0×10^{-6} 程度にあることが分かるので、 $\epsilon = 1.0 \times 10^{-6}$ とする。そこで、 $f(x)$ の座標成分 x に

$\gamma = k\epsilon = 1.0 \times 10^{-5} (k = 10)$ として、式(6)で与えられる一次分数変換を適用する。ただし、この問題は、1変数のため式(6)中の添字 i はなくなり、 $I = \{1\}$ となる。また、近接根領域の中心は原点とし、 $\alpha = 0$ とおく。変換された多項式は

$$\begin{aligned}
 g(u) = & u^6 - 0.1069301101927721 \times 10u^5 \\
 & + 0.7135382225858563 \times 10^{-1} u^4 \\
 & - 0.2084460784433966 \times 10^{-2} u^3 \\
 & + 0.3209955067797242 \times 10^{-4} u^2 \\
 & - 0.2667578523756347 \times 10^{-6} u \\
 & + 0.9327197632250444 \times 10^{-9}
 \end{aligned}$$

となる。このような変換により $g(u) = 0$ の近接根付近は拡大される。 $g(u) = 0$ を式(9)によるホモトピー法で解いたものが Case1 となる。さらに $\delta = 1.0 \times 10^{-5}$ として式(11)によりホモトピーパラメータにも一次分数変換を適用したものが Case3 である。このときの数値解を表1に示す。表中の No. は数値解を識別するための通し番号であり、各欄は2段になっており、上段が Case1、下段が Case3 で解いた場合の近似解である。なお、表中の (a, b) は、 $a + ib$ を意味している(以下の例を通して同様とする)。

この問題は、もとの問題の真の近接根の値が分かっているため、 $\gamma = 1.0 \times 10^{-5}$ でこれらの近接根を一次分数変換すると、変換された真の近接根として

$$\frac{1}{101}, \frac{51}{5101} \pm \frac{50}{5101}i, \frac{41}{2081} \pm \frac{20}{2081}i$$

を得る。

表1の結果から、Case1で解いた場合の誤差 $\Delta\hat{\alpha}$ と Case3で解いた場合の誤差 $\Delta\tilde{\alpha}$ を計算し、近似解の精度の向上を確認するために比 $\delta' = \Delta\tilde{\alpha}/\Delta\hat{\alpha}$ を計算する。計算された δ' の値を表2に示す。

表2中の δ' の値は、命題4.3によれば δ の近似値を与える。これらの近似値が、 $\delta = 1.0 \times 10^{-5}$ の十分良い近似値を与えており、命題4.3の正当性が確認される。

また、表1から、Case3のようにホモトピーパラメータに一次分数変換を適用して解いたときの $\Delta s = |1-s|$ の値は $\Delta s = 0.10 \times 10^{-13} \sim 0.60 \times 10^{-13}$ の範囲であることが分かり、これは命題 4.2 にあるように、Case1 で考えると、 $\Delta t = \delta \Delta s = 0.10 \times 10^{-18} \sim 0.60 \times 10^{-18}$ までパスを 1 へ近づけたことになる（逆に、終値付近においてホモトピーパラメータが 1.0×10^{-18} 程度の分解能で計算されるように、ここでは $\delta = 1.0 \times 10^{-5}$ とした）。通常倍精度の数値計算でも $1 + 10^{-18} = 1$ になってしまうため、変換によってもとの空間での計算限界以上の分解能でパラメータを 1 へ近づけたことになる。

ここで、Case2 の計算結果について言及しておく。Case2 では、座標空間への一次分数変換を適用していないため、近接根の値自身は数値として拡大されていない。そのため、ホモトピーパラメータに一次分数変換を適用するときは、パラメータをより 1 へ近づけることによって、すなわち分解能をより高くすることによって近接根を分離する必要がある。たとえば、 $\Delta s = 1.0 \times 10^{-15}$ のとき $\delta = 1.0 \times 10^{-15}$ とすれば $\Delta t = \delta \Delta s = 1.0 \times 10^{-30}$ となり、 $\delta = 1.0 \times 10^{-25}$ とすれば $\Delta t = 1.0 \times 10^{-40}$ となり、もとの問題の追跡精度以上の分解能でパスを 1 へ近づけることが可能となる。

$\delta = 1.0 \times 10^{-25}$ のときの Case2 における近接根の近似値の一部を表 3 に示す。このような近接根問題では、Case0 のように直接近似解を求めるとパス追跡の精度が不十分になるため収束精度が悪くなり、得られた近似解の精度を向上させるためにニュートン法を適用しても根が紛れる場合がある。しかし、Case2 のように δ を小さくとり、パラメータをより終値に近づければ十分な精度で近似解を計算することができ、一

次分数変換が有効であることが分かる。さらに、このようにして計算された近似解は十分な精度を持っており、ニュートン法の初期値として使用しても根が紛れることはなかった。もちろん、Case2 で計算される数値の精度を向上させる必要があればさらに δ を小さくすればよい。

ところで、この問題は、 γ を 1.0×10^{-5} よりも小さい値とすれば、ホモトピー法のパラメータに一次分数変換を適用しなくても Case1 のみで近接根を分離することは可能である。もちろん、パス追跡の精度を向上させる必要があれば、Case3 のようにホモトピーパラメータに一次分数変換を適用すれば上記のように近接根を分離したうえで、確実にパス追跡の精度を向上させることができる。

いい換えると、座標空間に適用する一次分数変換で使用する近接根領域を表すパラメータの見積りが悪い場合や、さらにパス追跡の精度を向上させる必要がある場合には、ホモトピーパラメータへの一次分数変換を利用すれば、より確実に近接根を分離でき計算精度の信頼性を向上させることができる。

問題 5.2 次の 10 変数連立代数方程式を考える。

$$\begin{aligned}
 f_1 &= x_1^4 - 10x_1 + x_{10}^4 - 10x_{10} + x_2^4 - 10x_2 \\
 &\quad + x_3^4 - 10x_3 + x_4^4 - 10x_4 + x_5^4 - 10x_5 \\
 &\quad + x_6^4 - 10x_6 + x_7^4 - 10x_7 + x_8^4 - 10x_8 \\
 &\quad + x_9^4 - 10x_9 + 1.0 \times 10^{-10} = 0 \\
 f_2 &= x_1^2 - x_1x_2 + x_2^2 - x_2x_3 + x_3^2 = 0 \\
 f_3 &= x_2^2 - x_2x_3 + x_3^2 - x_3x_4 + x_4^2 = 0 \\
 f_4 &= x_3^2 - x_3x_4 + x_4^2 - x_4x_5 - 10x_4 + x_5^2 = 0 \\
 f_5 &= x_4^2 - x_4x_5 + x_5^2 - x_5x_6 - 10x_5 + x_6^2 = 0 \\
 f_6 &= x_5^2 - x_5x_6 + x_6^2 - x_6x_7 - 10x_6 + x_7^2 = 0 \\
 f_7 &= x_6^2 - x_6x_7 + x_7^2 - x_7x_8 - 10x_7 + x_8^2 = 0 \\
 f_8 &= x_7^2 - x_7x_8 + x_8^2 - x_8x_9 - 10x_8 + x_9^2 = 0 \\
 f_9 &= x_{10}^2 - x_{10}x_9 + x_8^2 - x_8x_9 + x_9^2 - 10x_9 \\
 &= 0 \\
 f_{10} &= x_1^2 - x_1x_{10} + x_{10}^2 - x_{10}x_9 + x_9^2 = 0
 \end{aligned}$$

この問題を Case0 のホモトピー法で解き、パスを $|1-t| \approx 1.0 \times 10^{-13}$ まで追跡すると、原点中心の 1.0×10^{-6} 程度の領域に 8 本のパスが到達する。そして、到達した近似解を初期値として精度を向上させるために、ニュートン法を適用すると、近似解の収束

表 2 δ の近似値
Table 2 The approximate values of δ .

No.	$\Delta \hat{\alpha}$	$\Delta \tilde{\alpha}$	δ'
1	0.37822e-06	0.36829e-11	0.0000097375
2	0.40019e-06	0.40363e-11	0.000010086
3	0.10143e-06	0.10438e-11	0.000010291
4	0.19491e-06	0.19614e-11	0.000010063
5	0.60626e-06	0.60597e-11	0.0000099952

表 3 ホモトピー法の計算結果 (Case2)

Table 3 The results of the calculation of the homotopy method (Case2).

No.	数値解	$\Delta t, \Delta s$
1	(0.1000000002145254e-06, 0.2864254661591077e-15)	0.22e-15
2	(0.9999999885722997e-07, -0.1000000002587992e-06)	0.88e-15
3	(0.1999999997811629e-06, 0.9999999940376587e-07)	0.33e-15

表 4 ホモトピー法の計算結果の一部 (Case1)

Table 4 A part of the result of the calculation by the homotopy method (Case1).

No.	座標	数値解	Δt
1	u_1	(0.2501365202998926e-05, -0.1443786266216703e-05)	0.144e-13
	u_2	(0.2496440769299693e-05, -0.1443284623538097e-05)	
	u_3	(0.2499472187146005e-05, 0.1441183519795859e-05)	
2	u_1	(0.3336184182361535e-05, -0.8991336668068385e-10)	0.157e-13
	u_2	(0.3332400452178496e-05, 0.2558438422167405e-08)	
	u_3	(0.1665423361967430e-05, 0.2887283217104756e-05)	

表 5 ホモトピー法の計算結果の一部 (Case3)

Table 5 A part of the result of the calculation by the homotopy method (Case3).

No.	座標	数値解	Δs
1	u_1	(0.2499995846880142e-05, -0.1443368460263711e-05)	0.144e-13
	u_2	(0.2499995797733301e-05, -0.1443368455370725e-05)	
	u_3	(0.2499991661464651e-05, 0.1443375650891860e-05)	
2	u_1	(0.3333322250943274e-05, -0.1101863445828534e-14)	0.157e-13
	u_2	(0.3333322213131680e-05, 0.2580461346966993e-13)	
	u_3	(0.1666661098824608e-05, 0.2886741729095690e-05)	

精度が悪い場合近接根が紛れることがある。そこで、まずこれらの方程式に座標空間の一次分数変換を適用する。Case0 のパス追跡の結果から 1.0×10^{-6} 程度の領域に近接根が存在していると判断できるので、近接根領域を表すパラメータとして、 $\epsilon = 1.0 \times 10^{-6}$, $k = 1$ を採用する。このとき、 $I = \{1\}$ として、上式の f_1, \dots, f_{10} に式 (6) で与えられる一次分数変換を適用し、得られた多項式を g_1, \dots, g_{10} とする。ただし、近接根領域の中心は原点とし、 $\alpha = 0$ とおく。 g_1, \dots, g_{10} の形は紙面の関係で省略するが、 $g_1 = 0, \dots, g_{10} = 0$ を解くと、表 4 のようになる。

表 4 の近似解は、パスを $|1-t| \approx 1.0 \times 10^{-14}$ まで追跡したときの値であり、原点中心の 1.0×10^{-5} 程度の領域に 8 本のパスが到達するが、そのうちの 2 つを示している。また、座標の対応は、 $(x_1, x_2, \dots, x_{10}) \rightarrow (u_1, u_2, \dots, u_{10})$ であり、得られた $(u_1, u_2, \dots, u_{10})$ 成分のうちの u_1, u_2, u_3 成分の近似値を記入している。

この近似解を初期値としてニュートン法を適用すれば、分離性を保ったまま数回の繰返しの後に精度を向上させることができる。しかし、得られた近似解は、 1.0×10^{-5} 程度と小さく、近接根の分離という意味ではさらに分離性を高めた方が好ましい。分離性を高めるには、Case1 において近接根領域をさらに小さくしてもう一度同様の計算を行えばよい。このような操作によって近接根を確実に分離することは可能であるが、ここでは、近接根領域は固定したままで、パスの追跡精度を向上させるために、ホモトピー法のパラメータ t に一次分数変換を適用する。

ホモトピーパラメータ t が $|1-t| \approx 1.0 \times 10^{-19}$

表 6 命題 4.3 による δ の評価Table 6 The evaluation of δ by proposition 4.3.

No.	δ
1	0.00001004
2	0.00001007

の分解能を満たすまでパスを追跡するものとすれば、Case3 での Δs を 1.0×10^{-14} とし式 (22) から $\delta \approx 1.0 \times 10^{-5}$ を得る。したがって、ここでは、 $\delta = 1.0 \times 10^{-5}$ を採用する。ホモトピーパラメータに一次分数変換を適用した場合の結果を表 5 に示す。

ここで、近似解の誤差について命題 4.3 を適用し、一次分数変換が有効であることを確認しておく。ただし、この問題は、解析的に根を計算することが難しいため、先に述べたように近接根領域を絞り込み ($\epsilon = 1.0 \times 10^{-8}$, $k = 1$ とする)、Case1 により計算した近似解にニュートン法を適用した値を一次分数変換されたときの根とし、その値を基準値として採用する。このようにして得られた基準値の値は紙面の都合上省略するが、この基準値から問題 5.1 と同様に、 δ を計算すると表 6 のようになる。

表 6 から、命題 4.3 による δ の近似値が正確に計算されていることが分かる。

表 5 では、座標空間に一次分数変換を適用した場合の近似解を示しているが、それらの近似解をもとの問題へ戻すために、逆の一次分数変換を適用する。そして、その値を初期値としてニュートン法を適用すれば、もとの問題の近似解として表 7 のような結果を得る。

表 7 から、もとの問題では、近接根は 1.0×10^{-11} 程度になり、非常に強い近接度を持っているために通常の計算では、分離が難しいことが分かる。このよう

表 7 もとの問題の数値解の一部
Table 7 A part of the numerical solutions of the original problem.

No.	座標	数値解
1	x_1	(0.2499999999999514e-11, -0.1443375672974666e-11)
	x_2	(0.2499999999999098e-11, -0.1443375672973945e-11)
	x_3	(0.249999999999862e-11, 0.1443375672973583e-11)
2	x_1	(0.3333333333334259e-11, 0.3208012382867999e-24)
	x_2	(0.333333333333148e-11, 0.3209741780895422e-24)
	x_3	(0.166666666666296e-11, 0.2886751345948771e-11)

表 8 ホモトピー法の計算結果の一部 (Case2)
Table 8 A part of the result of the calculation by the homotopy method (Case2).

No.	座標	数値解	Δt
1	x_1	(0.2500000190217096e-11, -0.1443375696501511e-11)	0.10E-14
	x_2	(0.2499999806129783e-11, -0.1443375671178702e-11)	
	x_3	(0.2500000000843050e-11, 0.1443375568544976e-11)	
2	x_1	(0.3333333374659391e-11, 0.2801017621554906e-20)	0.22E-15
	x_2	(0.3333333298048479e-11, 0.4214700494651179e-19)	
	x_3	(0.1666666632975379e-11, 0.2886751336747900e-11)	

な近接根に対して、座標空間およびホモトピーパラメータへ一次分数変換を適用すると、確実に近接根を分離することができ、さらに計算精度の信頼性を向上させることが可能である。

なお、この問題に対してホモトピーパラメータのみ一次分数変換を適用する場合は、問題 5.1 と同様に δ を小さくとればよい。たとえば、 $\Delta s = 1.0 \times 10^{-15}$ 、 $\delta = 1.0 \times 10^{-15}$ とすれば $\Delta t = \delta \Delta s = 1.0 \times 10^{-30}$ の分解能となり、もとの問題の追跡精度以上にパスを 1 へ近づけることが可能となる。このときの近似解を表 8 に示す。この表から近接根に対して十分よい近似値を与えていることが確認され、この近似値をニュートン法で修正し精度を向上させれば近接根の近似値が紛れることなく計算される。

6. おわりに

連立代数方程式のすべての根を、数値計算で統一的に計算するための有効な方法にホモトピー法がある。しかし、近接の度合いが非常に強い根の場合には、パス追跡が不十分になるために、どうしても近似値が紛れることがある。このような場合にパス追跡の精度を向上させる目的で、ホモトピー法のホモトピーパラメータに一次分数変換を適用する方法を提案した。提案した方法では、パスの分解能を高めることによりパラメータを終値へより近づけることが可能となり、結果として近似解の計算精度の信頼性を向上させることができる。このことは、数値例に示すように、一次分数変換に適用するパラメータの見積りが悪い場合などに、近接根領域の拡大率を上げることなく、近接根へ向かうパス追跡の精度が向上することから確認できる。

また、ホモトピーパラメータへの一次分数変換が新たなホモトピーとしても定義され、この新たなホモトピーともとのホモトピーとの追跡精度の向上について比較し、ホモトピーパラメータへの一次分数変換が有効であることを示した。

ホモトピー法への一次分数変換の適用は、Case0, 1, 2, 3 のように 4 つの型に分類される。それぞれの特徴をまとめると次のようになる。

- (1) Case0
通常のホモトピー法の適用であり、近接度の強い根がある場合には、数値的な計算精度が失われてしまう。そこで、以下のような改良を適用する。
- (2) Case1¹¹⁾
座標空間のみ一次分数変換を適用することは、近接根を値として拡大し分離することに主眼が置かれている。しかし、筆者らの方法は単に近接根付近を拡大するだけでなく、同時に、擬局所化も可能な方法であるが、詳細は文献 11) などを参照されたい。
- (3) Case2
ホモトピーパラメータへ一次分数変換を適用することは、パス追跡の分解能を高めることにより追跡精度を向上させ近接根を分離する手法である。近接根は、値として拡大されていないため、適用する変換に使われる δ は、パス追跡の要求精度により小さくとる必要がある。また、この型では、近接根付近が拡大されていないため近接根付近のパスの振舞いを、そのまま反映できる特徴がある。

さらに、ホモトピーパラメータへの一次分数変換は、新たなホモトピーとして定義されるため代数的な処理は、座標空間への一次分数変換に比べて簡潔になる利点もある。

(4) Case3

従来の座標空間への変換と、今回提案するパラメータへの変換は同時に適用することが可能であり、近接根を値として拡大しつつパラメータをより終値に近づける特徴がある。数値例からも分かるように、両者を適用すれば、近接根を非常に安定して分離させることができる。

以上のように、連立代数方程式が近接根を持つ場合には、座標空間やホモトピーパラメータに一次分数変換を適用することが有効であることが確認される。そして、必要に応じてこれらの手法を組み合わせることで、さらに数値精度の信頼性が向上する。

参 考 文 献

- 1) 鈴木秀男, 小林英恒, 酒井明彦: 分数変換による近接根の分離について, 数式処理学会論文誌, Vol.2, No.2, pp.2-7 (1993).
- 2) 鈴木秀男, 小林英恒: 分数変換による近接根の分離, 数理科学講究録刊行会・数理科学講究録 920・数式処理における理論とその応用の研究, pp.202-215 (1995).
- 3) Suzuki, H., Kobayashi, H. and Sakai, Y.: Separation of close roots by linear fraction transformation, *Proc. 1995 ASIAN Symposium on Computer Mathematics*, Scientists Incorporated, pp.1-10 (1995).
- 4) 鈴木秀男, 小林英恒: 一次分数変換を利用した 1 変数代数方程式の近接根の分離, 情報処理学会第 51 回全国大会講演論文集, Vol.1, pp.3-4 (1995).
- 5) 鈴木秀男, 小林英恒: 一次分数変換を利用した近接根の分離方法とその誤差について, 情報処理学会論文誌, Vol.38, No.2, pp.180-191 (1997).
- 6) 鈴木秀男, 小林英恒: 連立代数方程式の近接根の分離と擬局所化の可能性について, 京都大学数理解析研究所・講究録 986・数式処理における理論と応用の研究, pp.136-146 (1997).
- 7) 鈴木秀男, 小林英恒: 連立代数方程式の擬局所化の過程で生じる誤差についての報告, 数式処理学会誌, Vol.6, No.1, pp.39-40 (1997).
- 8) 鈴木秀男, 小林英恒: 連立代数方程式の擬局所化の過程で生じる誤差について, 情報処理学会第 55 回全国大会講演論文集, Vol.1, pp.72-73 (Sept. 1997).
- 9) Kobayashi, H., Suzuki, H. and Sakai, Y.: Numerical calculation of the multiplicity of a solution to algebraic equations, *Mathematics*

of Computation, Vol.67, No.221, pp.257-270 (1998).

- 10) 鈴木秀男, 小林英恒: 連立代数方程式の減次の可能性について, 京都大学数理解析研究所・講究録 1038・数式処理における理論と応用の研究, pp.8-16 (Apr. 1998).
- 11) 鈴木秀男, 小林英恒: 一次分数変換を利用した連立代数方程式の近接根の分離と擬局所化における誤差について, 情報処理学会論文誌, Vol.40, No.12, pp.4178-4192 (1999).
- 12) 鈴木秀男, 小林英恒: 連立代数方程式の数値解法における一次分数変換の新たな適用について, 情報処理学会第 57 回全国大会講演論文集, Vol.1, pp.6-7 (1998).
- 13) 鈴木秀男, 小林英恒, 三島健稔: ホモトピー法への一次分数変換の適用法について, 情報処理学会第 59 回全国大会講演論文集, Vol.1, pp.95-96 (1999).
- 14) 小島政和: 相補性と不動点, 産業図書 (1981).
- 15) 森 正武, 室田一雄, 杉原正顕: 数値計算の基礎, 岩波書店 (1993).
- 16) Allgower, E.L. and Gerg, K.: *Numerical Continuation Methods*, Springer-Verlag (1990).
- 17) 上野健爾: 代数幾何入門, 岩波書店 (1995).
- 18) 篠原能材: 数値解析の基礎, 日新出版 (1987).

(平成 14 年 7 月 23 日受付)

(平成 15 年 10 月 16 日採録)



鈴木 秀男 (正会員)

1961 年生。1985 年東京電機大学理工学部数学科卒業。1987 年同大学大学院理工学研究科数理学専攻修士課程修了。同年雇用促進事業団神奈川技能開発センター電子計算機科勤務。1988 年東京職業訓練短期大学校情報処理科勤務。現在職業能力開発総合大学校東京校情報技術科助教授。数値計算, 数式処理, ハイブリッド計算に関する研究に従事。日本数式処理学会, 日本応用数理学会各会員。



小林 英恒 (正会員)

1945 年生。1967 年京都大学理学部数学科卒業。1969 年同大学大学院理学研究科数学専攻修士課程修了。同年日本大学理工学部数学科助手。現在日本大学理工学部数学科教授。理学博士。計算数学, 数式処理に関する研究に従事。著書『高校数学による REDUCE 入門』(サイエンティスト社)等多数。日本数学会, 日本数式処理学会各会員。