

Padé近似による代数方程式の反復解法

櫻井 鉄也, 鳥居 達生, 杉浦 洋

名古屋大学 工学部 情報工学科

代数方程式 $f(z)=0$ の1つの根を求めるための, 高次収束する反復公式の計算法を示す.
 $f(z)/f'(z)$ に対するPadé近似式の分子を, 有理式を連分数に展開するViscovatovの算法と
Euclidの互除法を組み合わせてることによって求め, この分子の零点を $f(z)$ の近似根とすること
で, 高次収束する反復法を得る.

この反復法は, 重根に対しても収束次数が変わらない特徴を持つ. また, 容易に収束次数の異
なる反復公式が得られるため, 要求精度に応じて反復法の収束次数を変えることが可能である.

An Iterative Method for Algebraic Equation by Padé Expansion

Tetsuya SAKURAI, Tatsuo TORII, Hiroshi SUGIURA

Department of Information Engineering, Faculty of Engineering,
Nagoya University

Furo-Cho, Chikusa-Ku, Nagoya 464-01, Japan

In this paper, we consider the iteration formulae with high order of convergence to solve the polynomial equation $f(z)=0$.

First, we derive the numerator of the Padé approximant for $f(z)/f'(z)$ by the Viscovatov's and the Euclidean algorithms. Next, we calculate the zeros of numerator and we use one of zeros for the next approximation. Whether the root is simple or multiple, the order of convergence of this iteration formula is always attained arbitrary positive integer m by the Taylor expansion of degree m for a given polynomial $f(z)$.

It is easy to get systematically formulae of different order, so we can choose the formulae of suitable order according to the required accuracy.

1. はじめに

代数方程式の解法としてはNewton-Raphson法がよく知られているが、初期値に対する依存性が強く、よい初期値を与える必要がある。我々は初期値依存性が弱く、反復回数も少ない方法を得るために、収束次数の高い方法について考える。

高次収束する反復法を得る方法として、Padé近似を用いる方法がある。分子の次数がM次で、分母の次数がN次の有理式を $r_{M,N}(z)=p(z)/q(z)$ とする。 z_0 における $F(z)$ のTaylor展開

$$F(z) = a_0 + a_1(z - z_0) + a_2(z - z_0)^2 + \dots$$

に対して

$$F(z)q(z) - p(z) = O((z - z_0)^{M+N+1})$$

が成り立つとき、この有理式を z_0 における $F(z)$ の $M+N$ 次Padé近似式、あるいは $[M/N]$ -Padé近似式と呼ぶ。 $r_{M,N}(z)$ は M と N に関して2次元の表を作り、これを $F(z)$ のPadé表と呼ぶ。また、この要素を $[M/N]$ とも表わす。表のすべての要素が異なるとき、Padé表は正規であるという。

いま z_0 を多項式 $f(z)$ の零点 ζ の近似とし、 $r_{M,N}(z)$ を z_0 における $f(z)$ の $M+N$ 次Padé近似式とする。このとき次の近似解 z'_0 を、 $p(z'_0)=0$ となるようにとる。このようにして得られる反復法は、もしPadé表が正規ならば、 $f(z)=0$ の単根に対して $M+N+1$ 次収束する¹⁾⁻³⁾。

Nourein^{4),5)}は分子の次数が1次のPadé近似式($[1/N]$ -Padé近似式)を用いて、任意の収束次数の反復公式を得た。また N を適当にとることによって、Newton法やHalley法などの従来知られている公式のいくつかが得られることを示した。

我々は次章で、 $f(z)/f'(z)$ の任意次数のPadé近似式の分子を得る算法を示し、それを用いて3章で、代数方程式 $f(z)=0$ の1つの根を求める反復公式を示す。ここで分子の次数を1とした場合には、Pomentaleの反復法⁶⁾とみなせる。また同様の算

法で、 $f(z)$ に対するPadé近似式も得られ、このとき分子の次数を1とすると、Noureinの公式となる。

本方法は、 $f(z)/f'(z)$ を近似していることにより、重根に対しても収束次数が変わらない特徴を持つ。また任意の収束次数の反復公式が容易に得られるため、要求精度に応じて反復公式の次数を変えることが可能である。

2. $f(z)/f'(z)$ に対するPadé表

2.1 対角要素の計算

$f(z)/f'(z)$ の任意次数のPadé近似式を求めるために、まず $f(z)/f'(z)$ の連分数展開を求める。これは $f(z)/f'(z)$ のPadé表の対角要素となる。

n 次の多項式 $f(z)$ の z_0 におけるTaylor展開を

$$f(z) = \sum_{i=0}^n \frac{f^{(i)}(z_0)}{i!} (z - z_0)^i = \sum_{i=0}^n a_i w^i$$

とする。ここで $w = z - z_0$ 。この展開を m 次で打ち切った多項式を $f_m(w)$ とすると

$$f(z) = f_m(w) + w^{m+1}(a_{m+1} + \dots + a_n w^{n-m-1})$$

と表わせるので

$$\frac{f(z)}{f'(z)} = \frac{f_m(w)}{f'_m(w)} + O(w^m) \quad (2.1)$$

である。このことから、もし $f_m(w)/f'_m(w)$ の $m-1$ 次Padé近似式を得たならば、それはまた、 $f(z)/f'(z)$ に対しても $m-1$ 次Padé近似式となることがわかる。

$f_m(w)/f'_m(w)$ の連分数展開を得るために、以下に示すViscovatovの算法⁷⁾⁻⁹⁾を用いる。

$$h_0 = \frac{f_m(w)}{f'_m(w)} = \frac{a_0 + a_1 w + a_2 w^2 + \dots + a_m w^m}{b_0 + b_1 w + b_2 w^2 + \dots + b_{m-1} w^{m-1}}$$

とする。この右辺を次のように変形する。

$$h_0 = \frac{a_0}{b_0} + \frac{a_0 + a_1 w + a_2 w^2 + \dots - a_0}{b_0 + b_1 w + b_2 w^2 + \dots} - \frac{a_0}{b_0}$$

$$= \frac{a_0}{b_0} + \frac{(a_0 + a_1 w + \dots) - \frac{a_0}{b_0}(b_0 + b_1 w + \dots)}{b_0 + b_1 w + b_2 w^2 + \dots}$$

ここで $c_0 = a_0/b_0$ とおくと上式は

$$h_0 = c_0 + \frac{w(a_1 - c_0 b_1) + (a_2 - c_0 b_2)w + \dots}{b_0 + b_1 w + b_2 w^2 + \dots}$$

$$= c_0 + \frac{w}{\frac{b_0 + b_1 w + b_2 w^2 + \dots}{(a_1 - c_0 b_1) + (a_2 - c_0 b_2)w + \dots}} \quad (2.2)$$

式(2.2)を

$$h_0 = c_0 + \frac{w}{h_1}$$

とおく。つぎに h_1 に対して同様の操作を行い

$$h_0 = c_0 + \frac{w}{c_1 + \frac{w}{h_2}}$$

を得る。この計算を繰り返して、展開を c_{m-1} で打ち切ると

$$\frac{f_m(w)}{f'_m(w)} = c_0 + \frac{w}{c_1} + \frac{w}{c_2} + \dots + \frac{w}{c_{m-1}} + O(w^m)$$

となる。この連分数は式(2.1)より、 $f(z)/f'(z)$ に対しても $m-1$ 次の Padé 近似式となる。この連分数展開の有理式表現 P_{m-1}/Q_{m-1} は、次のような漸化式によって求められる。

$$P_{-1} = 1, P_0 = c_0, Q_{-1} = 0, Q_0 = 1,$$

$$\begin{cases} P_i = c_i P_{i-1} + w P_{i-2}, \\ Q_i = c_i Q_{i-1} + w Q_{i-2}, \quad i = 1, 2, \dots, m-1. \end{cases} \quad (2.3)$$

分子 P_{m-1} と分母 Q_{m-1} の次数は

$$\deg(P_{m-1}) = \left\lfloor \frac{m}{2} \right\rfloor, \quad \deg(Q_{m-1}) = \left\lfloor \frac{m-1}{2} \right\rfloor \quad (2.4)$$

である。この算法によって、Padé 表中の図1のような位置の要素が求められる。

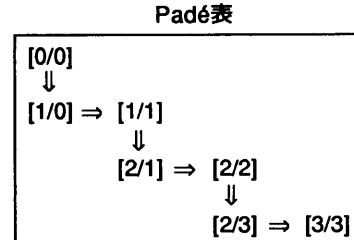


図1 Viscovatovの算法により得られる要素

2.2 非対角要素

Viscovatovの算法で得られた要素から、次の定理に示されるような Padé 近似式どうしの関係を用いて、それ以外の要素を求める。

定理1 $p_1/q_1, p_2/q_2$ を F のそれぞれ m_1, m_2 次の互いに異なる Padé 近似式とし、 $m_1 \geq m_2, \deg(p_1) \geq \deg(p_2)$ とする。また Padé 表は正規であるとする。有理式 p_{i+2}/q_{i+2} を

$$p_{i+2} = p_i - \alpha_i p_{i+1}, \quad i \geq 1, \quad (2.5)$$

$$q_{i+2} = q_i - \alpha_i q_{i+1}, \quad i \geq 1$$

とする。ここで α_i は w についての多項式で

$$\deg(p_{i+2}) = \deg(p_{i+1}) - 1 \quad (2.6)$$

となるように選ぶ。もし

$$\max(\deg(p_2) + \deg(q_1), \deg(p_1) + \deg(q_2)) = m_2 + 1 \quad (2.7)$$

ならば、 p_{i+2}/q_{i+2} は F の m_2 次 Padé 近似式である。

定理2 $p_1/q_1, p_2/q_2$ を、Viscovatovの算法で得られた F のそれぞれ $m, m-1$ 次 Padé 近似式とし、

Padé表は正規であるとする。このとき式(2.5),(2.6)で得られる $p_{i+2}/q_{i+2}, i \geq 1$ は、 F の $m-1$ 次Padé近似式である。

定理3 P_m, P_{m-1}, P_{m-2} をそれぞれViscovatovの算法で得られる $m, m-1, m-2$ 次のPadé近似式の分子とする。このとき、 P_m を P_{m-1} で割った剰余と wP_{m-2} を P_{m-1} で割った剰余は等しい。

式(2.5)と(2.6)をみると、 p_{i+2} の計算には p_{i+1} と p_i のみが必要である。いま分子の零点が必要なのであるから、分子だけを求めればよい。この計算はEuclidの互除法にほかならない。したがって、Viscovatovの算法で P_{m-1} まで求めて、 wP_{m-2} を P_{m-1} で割った剰余列を互除法によって求めればよい。

図2a, bの場合はBakerの算法¹⁰⁾とGraggの算法¹¹⁾に関係し、図2.cの場合はKroneckerの算法¹²⁾と一致する。したがって式(2.5),(2.6)を用いた算法は、これらの算法を含んでいることになる。

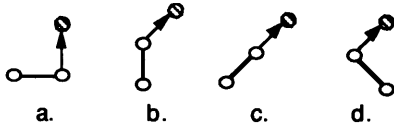


図2 定理1の条件を満たす要素

3. 任意次数の反復法

ここで、代数方程式 $f(z)=0$ の1つの根を求めるために、近似根 z_0 で $f(z)$ の m 次Taylor多項式を用いた反復公式を求めるアルゴリズムを示す。

- 1) 近似根 z_0 での $f(z)$ の m 次Taylor多項式を求める。
- 2) これよりViscovatovの算法によって c_0, \dots, c_{m-1} を求める。
- 3) c_0, \dots, c_{m-1} から3項漸化式(2.3)によって P_{m-2}, P_{m-1}

z_1 を求める。

4) wP_{m-2} を P_{m-1} で割った剰余列を、Euclidの互除法により求める。剰余多項式の次数が、2または1となったところで互除法をやめる。このとき得られた剰余は、 $f(z)$ の $[2/m-3]$ または $[1/m-2]$ -Padé近似式の分子となる。

5) 分子の零点 d を求める。次数が2のときは、新しい近似根 z'_0 が近似根 z_0 に近くなるほうを選び d とする。新しい近似根を $z'_0 = z_0 + d$ とする。

$[1/m-2]$ -Padé近似式を用いたときには、Pomentele⁶⁾の公式とみなせる。とくに $m=4$ のとき $[2/m-3]$ -Padé近似式は、静電場モデルによる方法¹⁴⁾と一致する。

ここで多項式 $f(z)$ が重根を持っているときの、本方法の近似根のふるまいについて考える。 $f(z)$ の相異なる根を ζ_1, \dots, ζ_k とし、

$$g_1(z) = \prod_{i=1}^k (z - \zeta_i)$$

とすると

$$\begin{aligned} f(z) &= g_1(z)h(z), \\ f'(z) &= g_2(z)h(z) \end{aligned}$$

と表わせる。このとき

$$\begin{aligned} \left(\frac{f(z)}{f'(z)} \right)^{(i)} &= \left(\frac{g_1(z)h(z)}{g_2(z)h(z)} \right)^{(i)} \\ &= \sum_{j=0}^i \binom{i}{j} \left(\frac{g_1(z)}{g_2(z)} \right)^{(j)} \left(\frac{h(z)}{h(z)} \right)^{(i-j)} \\ &= \left(\frac{g_1(z)}{g_2(z)} \right)^{(i)} \end{aligned}$$

であることから、 $f(z)/f'(z)$ と $g_1(z)/g_2(z)$ は同じPadé近似式を持つ。 $g_1(z)$ は単根のみを持つ多項式であったから、結局本方法は、重根に対しても単根のときと同じふるまいをすることがわかる。

4. 数値例

本方法を用いたいくつかの数値例を示す。計算はFORTRAN 4倍精度で行った。計算機は名古屋大学大型計算機センターのFACOM M-780を使用した。

1) $f(z)$ のTaylor多項式の次数 m と収束次数の関係。多項式は

$$f(z) = (z-1)^3(z-2)(z-3)(z-4)(z-5)$$

とし、初期値 z_0 が1.01と2.01の場合の、1回反復後の近似根 z'_0 の誤差を示す(表1)。

以下の数値例では、問題とする多項式は根を領域 $[-1,1] \times [-1,1]$ に乱数で配置し、初期値は常に $z_0=1+i$ とした。

2) 100個の多項式に対して、1つの根を求めるまでの平均の反復回数とTaylor多項式の次数 m の関係。ここで多項式の次数は $n=50$ (図3)。

3) 2)の場合の平均の計算時間とTaylor多項式の次数の関係(図4)。

4) $[1/m-2]$ -Padé近似を用いて、 $f(z)$ と $f(z)/f'(z)$ を近似したときの、多項式の次数 n による平均の反復回数の変化。 $m=5$ とした(図5)。

これらの実験結果から、 m 次のTaylor展開を用いると、 m 次収束してることがわかる。また m が大きいほうが反復回数が少なく、そのばらつきも小さくなる傾向がある。

$f(z)$ を近似したときと $f(z)/f'(z)$ を近似したときを比べると、多項式の次数が高いときには、 $f(z)/f'(z)$ のPadé近似式を用いた方が反復回数はかなり減少する。

m	$z_0=1.01$	$z_0=2.01$
	$ z'_0-1.0 $	$ z'_0-2.0 $
4	7.01×10^{-10}	1.69×10^{-7}
5	3.58×10^{-12}	3.36×10^{-10}
6	1.65×10^{-14}	8.12×10^{-12}
7	7.46×10^{-17}	3.17×10^{-14}

表1 1回反復後の近似根の誤差

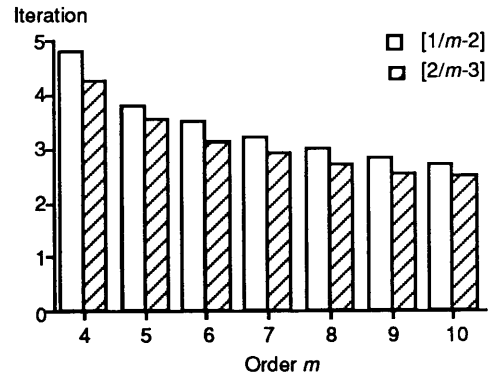


図3 100個の多項式に対する平均の反復回数

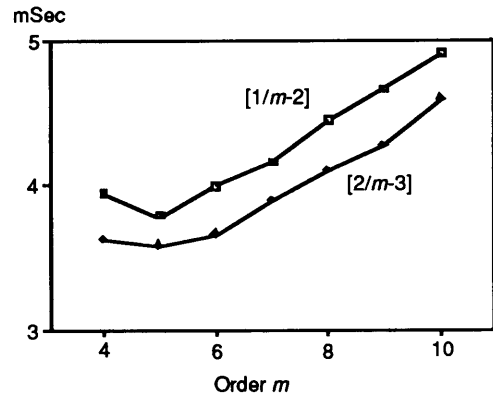


図4 100個の多項式に対する平均の計算時間

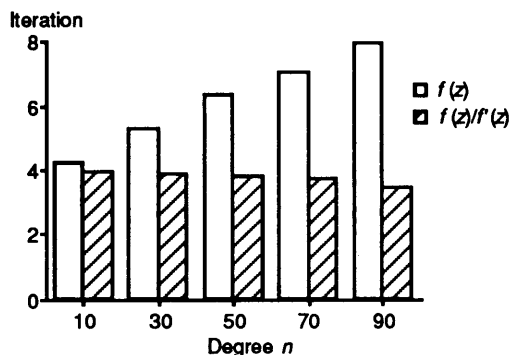


図5 $f(z)$ と $f(z)/f'(z)$ による反復回数の差

5. おわりに

代数方程式 $f(z)=0$ の解を求めるために、Viscovatovの算法を用いて有理式 $f(z)/f'(z)$ を連分数展開し、これより得られるPadé近似式の分子に対してEuclidの互除法を適用することにより、分子の次数の低いPadé近似式の分子を得る算法を示した。この分子の零点を用いることによって、任意の収束次数を持つ反復公式を得た。

本方法は、重根に対しても収束次数が落ちることとはなく、多項式の次数が高くても反復回数が増えることはない。また、容易に収束次数のことなる公式が得られるため、要求精度に応じて次数を変えることが可能である。

本論文で示した有理式に対するPadé近似式の算法は、実係数代数方程式の共役な根を求めるための2次因子を求める算法や、重根に対して高い収束次数を持つ全根同時反復公式に応用できる。

参考文献

1) Tornheim, L.: Convergence of multipoint iterative methods, *J. Assoc. Comput. Mach.* 11, pp. 210-220 (1964).

2) Merz, G.: Padéche Nähungsbrüche und iterationsverfahren höherer ordnung, *Computing* 3, pp. 165-183 (1968).

3) Chisholm, J.: Approximation by sequences of Padé approximants in region of meromorphy, *J. Math. Phys.*, Vol. 7, No. 1, pp. 39-44 (1966).

4) Nourein M.: Root determination by use of Padé approximants, *BIT* 16, pp. 291-297 (1976).

5) Claessens, G.: Loizou, G. and Wuytack, L.: Comments on a root finding method using Padé approximation, *BIT* 17, pp. 360-361 (1977).

6) Pomentale, T: A class of iterative method for holomorphic functions, *Numer. Math.* 18, pp. 193-203 (1971).

7) Baker, G., Graves-Morris, P.: Padé Approximants I, Addison-Wesley, London (1981).

8) Cuyt, A., Wuytack, L.: Nonlinear Methods in Numerical Analysis, North-Holland, Amsterdam (1987).

9) Bultheel, A.: Recursive algorithms for the Padé table: Two approaches, pp. 211-230, in 13).

10) Baker, G.: Essentials of Padé Approximants, Academic Press, New York (1975).

11) Gragg, W. G.: The Padé table and its relation to certain algorithms of numerical analysis, *SIAM Review* Vol. 14, No. 1, pp. 1-62 (1972).

12) McEliece, R. and Shearer, J.: A property of Euclid's algorithm and an application to Padé approximation, *SIAM J. Appl. Math.*, Vol. 34, No. 4, pp. 611-615 (1978).

13) Wuytack, L.: Padé Approximation and Its Applications, Proc. Antwerp (1979).

14) 櫻井鉄也, 鳥居達生, 杉浦洋: 静電場的解釈による代数方程式の反復解法, 情報処理学会論文誌, Vol. 29, No. 5, pp. 447-455 (1988).