

Durand-Kerner 法および Ehrlich-Aberth 法の近似解の挙動について

広島市立大学大学院情報科学研究科 松浦 徹 (Toru Matsuura)

広島市立大学情報科学部 藤野清次 (Seiji Fujino)

広島市立大学情報科学部 児島 彰 (Akira Kodama)

概要. 代数方程式の全部の根を同時に求める Durand-Kerner 法系統の反復解法は、大抵の初期値に対して真解に収束することが経験的に知られている。しかし、その初期値と代数方程式の根がある特別な位置関係になったときには、反復回数が増えるに従って、反復解法の理論的に導き出された近似解の動きと数値的に求められた近似解のそれとは全然異なるものになることがある。本稿ではそのような現象が起こる場合と起こらない場合とについて、ある 2 次方程式を例にとってその理由について考察することにする。

1 はじめに

n 次代数方程式

$$P(z) = a_0 z^n + a_1 z^{n-1} + \cdots + a_{n-1} z + a_n = 0 \quad (a_0 \neq 0) \quad (1.1)$$

の全ての根を同時に求める反復法は一般に全根同時反復法と呼ばれる。その中には、2 次収束する Durand-Kerner 法 (以下、D-K 法と呼ぶ) [3] [7] や 3 次収束する Ehrlich-Aberth 法 (以下、E-A 法と呼ぶ) などがある [1] [4]。全根同時反復法の研究は、Weierstrass [9]、Durand [3]、Dochev [2] らの先駆的研究がそのきっかけになって始まったが、最近の分散メモリ型並列計算機の急速な発達とその普及に伴って、それらの反復解法が持つ自然な並列性が現在も注目を浴びている [8]。

従来より全根同時反復法に対して、「どのような初期値を選んでも全根同時反復法は必ず収束するのか？」という素朴な疑問が存在する。しかし、この命題に対して現在までのところ理論面からは部分的な解答しか得られていない [5]。一方、近似解が収束しない数値例については、例えば、文献 [10] で、方程式が $P(z) = z^2 + 1 = 0$ のとき、初期値を実軸にとると D-K 法が発散することが報告されている。また、文献 [6] では、方程式が $P(z) = z^4 + 1 = 0$ のとき、初期値を実軸上と虚軸上にそれぞれ与えると数値解が振動したという報告がなされている。しかし、いずれにおいても理論的な考察はされていない。

そこで、本稿の目的は、D-K 法や E-A 法のような全根同時反復法の初期値と代数方程式の根がある特別な位置関係になったとき、反復回数が増えるに従って、理論的に導き出された近似解の動きと数値的に求められた近似解のそれとが全然異なったものになっていく場合とそうでない場合があることを 2 次方程式を例にとって報告し、その理由について考察することにある。

最後に、本稿の構成について述べる。まず、第 2 節で全根同時反復法の一つである Durand-Kerner 法と Ehrlich-Aberth 法のアルゴリズムについて簡単に紹介する。第 3 節では、方程式の根と反復法の初期値がある特別な位置関係にある 2 次方程式の例を二つ紹介する。第 4 節では Durand-Kerner 法そして第 5 節では Ehrlich-Aberth 法について、各々の反復法の近似解の動きをまず理論的に明らかにし、さらにそれと数値計算で求められた近似解の動きとを比較し、両者の差異を明らかにする。第 6 節で本研究のまとめを行なう。

2 D-K 法と E-A 法

与えられた n 次代数方程式

$$P_n(z) = a_0 z^n + a_1 z^{n-1} + \cdots + a_n \quad (2.1)$$

$$= a_0 \prod_{i=1}^n (z - \alpha_i) = 0 \quad (a_0 \neq 0) \quad (2.2)$$

の全部の根 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ を適当な初期値から出発して同時に求めていく反復解法、すなわち、

$$z_i^{(k+1)} = z_i^{(k)} - \sigma_i^{(k)}, \quad (2.3)$$

$$\sigma_i^{(k)} = \frac{P_n(z_i^{(k)})}{a_0 \prod_{j \neq i}^n (z_i^{(k)} - z_j^{(k)})} \quad (i = 1, \dots, n) \quad (2.4)$$

で表される反復解法を D-K 法と呼ぶ。ここで、上付き添字^(k) は反復回数を表す。この D-K 法は、Newton 法の 1 種であるから、求めた近似解 $z_i^{(k)}$ が $P_n(z)=0$ の根 α_i の十分よい近似解でかつ根 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ がすべて異なる場合には 2 次収束する。ここで、(2.3) 式を D-K 法のアルゴリズムと呼び、(2.4) 式を D-K 法の補正項と呼ぶことにする。

一方、Aberth は、(2.2) 式に示した n 次代数方程式の両辺の自然対数を取り、それを微分することにより、次の (2.5) 式に示す反復解法を導いた。

$$z_i^{(k+1)} = z_i^{(k)} - \frac{\frac{P_n(z_i^{(k)})}{P'_n(z_i^{(k)})}}{1 - \frac{P_n(z_i^{(k)})}{P'_n(z_i^{(k)})} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{1}{z_i^{(k)} - z_j^{(k)}}} \quad (i = 1, \dots, n). \quad (2.5)$$

この反復解法は Ehrlich-Aberth 法とも呼ばれる。収束次数は 3 次である。

3 方程式の根と反復法の初期値との位置関係

3.1 第 1 例

ここでは、解くべき方程式の根と初期値が、図 1 に示すような複素平面上で特別な位置関係になったときについて考える。このような相対的な位置関係をここでは天空鳳型と呼ぶ。方程式を (3.1) 式に、初期値を (3.2) 式に示す。

$$P_2(z) = (z - (a + bi))(z - (a' + bi)), \quad (3.1)$$

$$z_1^{(0)} = c + di, \quad z_2^{(0)} = c + d'i. \quad (3.2)$$

ここで、 a, a', b, c, d, d' はすべて定数であり、 $d + d' = 2b$ の関係がある。

図 1 において、 $\bullet$ 印は方程式の根、 $\circ$ 印は初期値そして点 M は $\overline{AC}$ と $\overline{BD}$ の交点を表す。また、 $d + d' = 2b$ の関係から $\overline{BM} = \overline{DM}$ 、すなわち、 $\overline{DA} = \overline{BA}$ 、 $\overline{BC} = \overline{DC}$ となる。

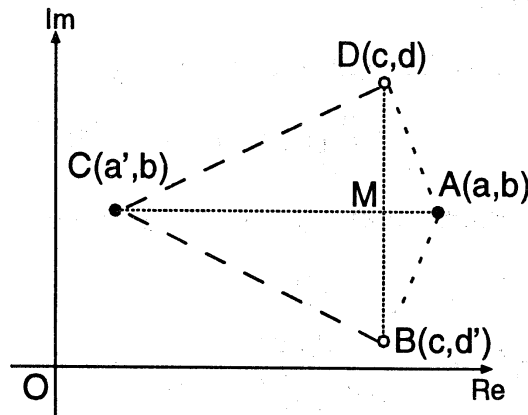


図 1: 天空型の場合の根と初期値の位置関係

3.2 第2例

ここでは，解くべき方程式の根と初期値が，図2に示すような複素平面上で特別な位置関係になったときについて考える．このような相対的な位置関係をここでは菱形と呼ぶ．方程式を(3.3)式に，初期値を(3.4)式に示す．

$$P_2(z) = (z - (a + bi))(z - (2c - a + bi)), \quad (3.3)$$

$$z_1^{(0)} = c + di, \quad z_2^{(0)} = c + (2b - d)i. \quad (3.4)$$

ここで， a, b, c, d はすべて定数であり， $d - b = \pm(c - a)$ の関係がある．

図2において， $\bullet$ 印は方程式の根， $\circ$ 印は初期値そして点 M は $\overline{AC}$ と $\overline{BD}$ の交点を表す．また， $d - b = \pm(c - a)$ の関係から $\overline{BM} = \overline{DM}$ ，すなわち， $\overline{AB} = \overline{CB} = \overline{CD} = \overline{AD}$ となる．

次の節では，方程式の根と初期値が上で述べたような二種類の相対的な位置関係（天空型と菱形）にあるときの D-K 法と E-A 法の近似解の動きについて，そのアルゴリズムを元に考えることにする．

4 D-K 法の近似解の動きの解明と数値実験

4.1 天空型の場合

(2.3) 式に示した D-K 法のアルゴリズムと $d + d' = 2b$ の関係から，初期値 $z_1^{(0)}$ を出発点として D-K 法の反復計算を 1 回行くと，次の近似解 $z_1^{(1)}$ の値は

$$z_1^{(1)} = \frac{a + a'}{2} + \frac{(d^2 - b^2) + (c - a)(c - a')}{2(d - b)}i \quad (4.1)$$

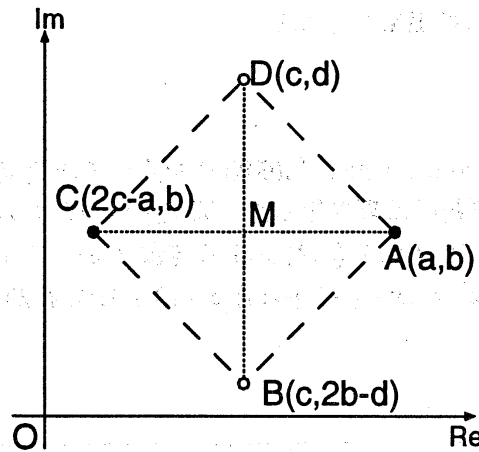


図 2: 菱形の場合の根と初期値の位置関係

となる. 同様に, もう一つの初期値 $z_2^{(0)}$ を出発点として D-K 法の反復計算を 1 回行くと次の近似解 $z_2^{(1)}$ の値は

$$z_2^{(1)} = \frac{a+a'}{2} + \frac{(d^2 - 4bd + 3b^2) + (c-a)(c-a')}{2(d-b)}i \quad (4.2)$$

となる. ここで, $\frac{a+a'}{2}$ を A , (4.1) 式の虚数部を B , (4.2) 式の虚数部を C とおく. D-K 法の反復を引続きさらに 1 回繰り返すと, そのときの近似解 $z_1^{(2)}, z_2^{(2)}$ の値は, (2.3), (2.4) 式から

$$\begin{aligned} z_1^{(2)} &= A + \left(B + \frac{(A-a)(A-a') - (B-b)^2}{B-C} \right)i, \\ z_2^{(2)} &= A + \left(C - \frac{(A-a)(A-a') - (C-b)^2}{B-C} \right)i \end{aligned} \quad (4.3)$$

となる. ここで, $A = \frac{a+a'}{2}$ の関係から, (4.3) 式の $z_1^{(2)}, z_2^{(2)}$ と, (4.1) 式の $z_1^{(1)}$, (4.2) 式の $z_2^{(1)}$ の実数部がすべて等しいことがわかる. これは, D-K 法の補正項の計算の中に, その虚数部に $(2A - a - a')$ という項を含む関数値 $P_2(z_1^{(k)}), P_2(z_2^{(k)})$ の計算が含まれているためである. この結果, $P_2(z_1^{(k)}), P_2(z_2^{(k)})$ は常に実数, そして (2.4) 式の D-K 法の補正項は常に虚数になる. したがって, 近似解の実数部: $\frac{a+a'}{2}$ は反復を繰り返しても変化しない. 以上の考察から, 方程式の根と反復の初期値が天空風型の位置関係にあるとき, D-K 法の近似解は複素平面上で虚軸に平行な直線 ($z = \frac{a+a'}{2}$) 上を動くことがわかった.

4.2 菱形の場合

$z_1^{(0)}, z_2^{(0)}$ を反復の初期値とし, D-K 法の反復計算を 1 回行くと, 近似解 $z_1^{(1)}, z_2^{(1)}$ は, $d-b = \pm(c-a)$ の関係から, まったく同じ値

$$z_1^{(1)} = c + bi, \quad z_2^{(1)} = c + bi \quad (4.4)$$

となる．このため， $z_1^{(1)} - z_2^{(1)} = 0$ となり，(2.4) 式の D-K 法の補正項の分母は 0 になる．そのため，それ以降の反復の繰り返しは出来なくなる．

4.3 数値実験による検証

GATEWAY 社の G6-200(Pentium Pro, 200MHz) を用いて数値実験を行った．プログラムは C 言語で作成し，演算はすべて倍精度演算で行った．天空風型の場合の反復 100 回までの D-K 法の近似解の軌跡を図 3 に示す．また，(3.1), (3.2) 式中の定数は $a=-1, a'=3, b=2, c=5, d=-2, d'=6$ とした．すなわち，方程式 $P_2(z) = (z - (-1+2i))(z - (3+2i))$ ，初期値 $z_1^{(0)} = 5-2i, z_2^{(0)} = 5+6i$ である．

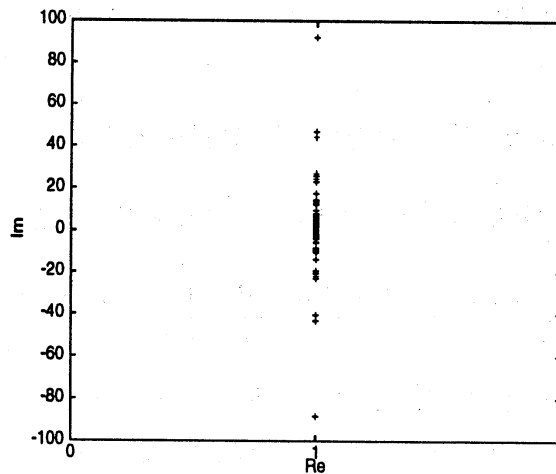


図 3: 天空風型の場合の D-K 法の近似解の軌跡．

図 3 から，近似解は前の 4.1 節で導出した

$$z = \frac{a + a'}{2} = \frac{-1 + 3}{2} = 1 \quad (4.5)$$

という虚軸に平行な直線上を動いていることがわかる．さらに，100 回を超えた後も計算を繰り返すと 167 回目の反復で収束した．これは，反復回数が増えるに従って近似解の中に数値誤差が入り，その結果本来 0 である $(2A - a - a')$ の値がそうならなくなったためである．

一方，菱形の場合には，定数の値を $a=-1, b=1, c=2, d=0$ として数値実験を行った．すなわち，方程式 $P_2(z) = (z - (-1+i))(z - (5+i))$ ，初期値 $z_1^{(0)} = 2, z_2^{(0)} = 2+2i$ である．このときの結果を表 1 に示す．前の 4.2 節で行った考察のように，実際にも D-K 法の反復は 1 回だけ行うことができ，それ以降は， $z_1^{(1)}, z_2^{(1)}$ の値が等しくなったために計算ができなかった．

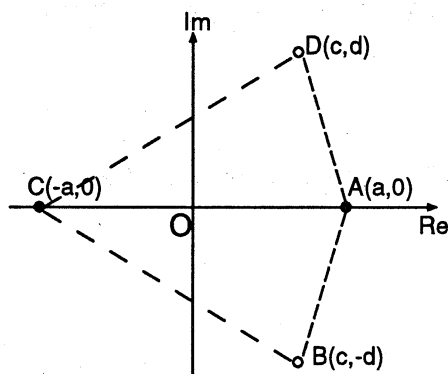
表 1: 菱形の場合の近似解の値の変化.

	初期値	1 回目	2 回目	3 回目
近似解 $z_1^{(k)}$ の値	2	$2+i$	不可	...
近似解 $z_2^{(k)}$ の値	$2+2i$	$2+i$	不可	...

5 E-A 法の近似解の動きの解明と数値実験

5.1 原点周りの天空風型の場合

ここでは, 一般の天空風型を考える前に, その特別の場合, すなわち定数 $a' = -a, d' = -d, b = 0$ のときを考える. このとき, 方程式の根は $z = a, z = -a$ であり, 初期値は $c \pm di$ となる. このときの E-A 法の近似解の動きについて考える. 図 4 に方程式の二つの根: A, C (●印) と初期値: B, D (○印) の位置関係を表す.

図 4: 方程式の根: $z = a, z = -a$ と初期値 $c \pm di$ の位置関係.

次に, 定数を $a=2, a'=-2, b=0, c=1, d=3, d'=-3$ とおく. このとき, 方程式: $P_2(z) = (z-2)(z-(-2))$, 初期値: $z_1^{(0)} = 1+3i, z_2^{(0)} = 1-3i$ になる. E-A 法の近似解の軌跡を図 5 に示す. 反復を 1000 回繰り返しても解 ($z = a, z = -a$) に収束しなかった. 図 5 の近似解の軌跡の様子から, E-A 法の近似解はある円の周上を動く と推測される.

そこで, 次にこの円について考える. まず, 円の中心を求めると, 図 6 に示すように初期値と第 1 近似解を結ぶ線分の垂直 2 等分線の交点を中心である.

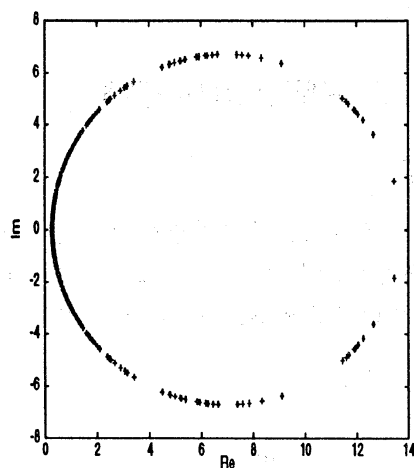


図 5: E-A 法の近似解の軌跡 (反復 100 回までを表示, 1000 回でも収束せず).

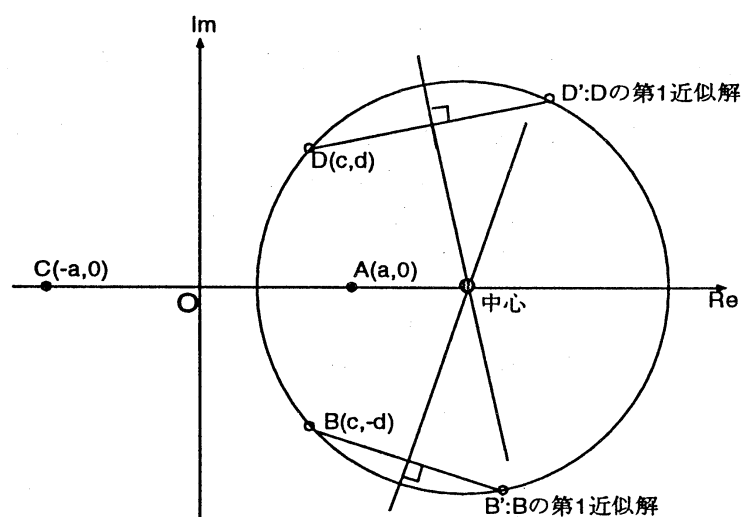


図 6: 初期値:D(B) と第 1 近似解: $D'(B')$ を結ぶ二つの垂直 2 等分線と円の中心.

そこで、初期値と第1近似解を結んだ線分の垂直2等分線から円の中心の座標を求めると、

$$\left(\frac{a^2 + c^2 + d^2}{2c}, 0 \right) \quad (5.1)$$

となる。円の半径は中心から初期値までの距離から求められる。

ここで、方程式の根と第1近似解の相対的な位置関係を調べてみると、やはり天空鳳型となっている。このため、反復1回目のときと同様に、第1近似解をいま新たな初期値と考えると、次の第2近似解も同じ円の周上に位置することが推測できる。このようにして、得られた近似解を次の反復の新たな初期値とみなすと、方程式の根と近似解の相対的な位置関係は常に天空鳳型であり、それらは円の中心が(5.1)式で表される円の円周上を動くと思われる。

そこで、近似解が(5.1)式を円の中心とする円周上にあるかどうかを確認するために、図5に示した近似解の軌跡に円を重ねて描いたものを図7に示す。ただし、 $a=2, a'=-2, b=0, c=1, d=3, d'=-3$ とする。この図から、円の中心: $((2^2+1^2+3^2)/2, 0)=(7, 0)$ 、円の半径: $\sqrt{(7-1)^2+(0-3)^2}=\sqrt{45}=3\sqrt{5}\doteq 6.708203932$ を持つ円の周上を近似解が動いていることが確かめられた。表2に、反復200回ごとの近似解 $z_1^{(0)}$ の値とそれと円の中心(7,0)との距離を示す。円周上を近似解が動いていることが数値からもわかる。また、定数 a については、整数値ではなく $a=2.1, a'=-2.1$ のように変えても計算したが、反復1000回繰り返しても上と同様に収束しなかったことを付記する。

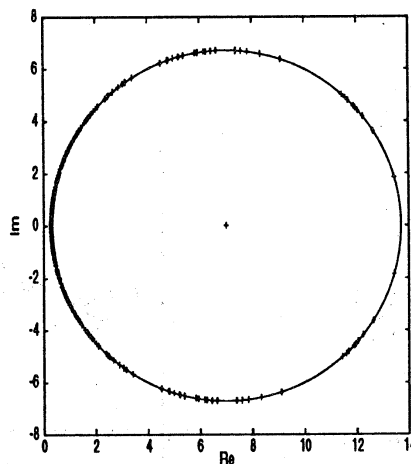


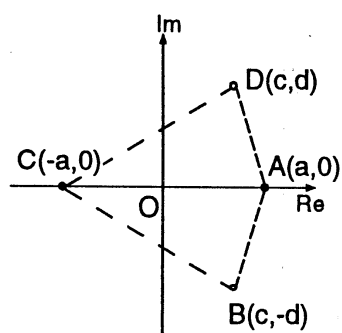
図7: 近似解の軌跡と理論から求めた円を同時に描いたもの(反復100回まで表示)。

5.2 一般の天空鳳型の場合

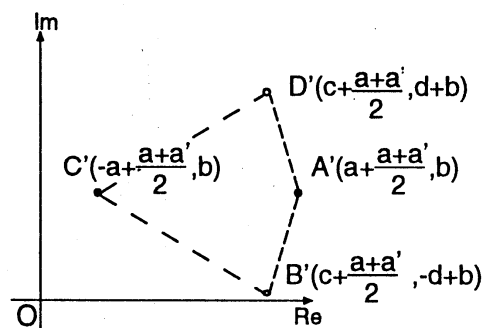
ここでは、前の節の原点周りの天空鳳型の場合の考察結果に基づいて、方程式の根と初期値が一般の天空鳳型の場合にあるときの反復法の近似解の軌跡について考える。いま、実軸方向に $\frac{a+a'}{2}$ 、虚軸方向に b だけ平行移動した場合を考えると、この場合もその近似解は円の周上を動く。その概略を図8に示す。

表 2: 反復ごとの近似解 $z_1^{(0)}$ の変化.

回数	近似解 $z_1^{(0)}$	円の中心との距離
初期	(1.00000000, 3.00000000)	6.70820379
100	(0.52275133, 1.74506140)	6.70820332
200	(8.45602322, 6.54827881)	6.70820093
400	(0.59064054, -1.97993112)	6.70820522
600	(0.29181030, 0.01419448)	6.70820427
800	(4.79405880, 6.33511925)	6.70819759
1000	(0.77505571, 2.50000596)	6.70820093



(a) 原点周りの天空風型



(b) 一般の天空風型

図 8: 原点周りの天空風型を実軸方向に $\frac{a+a'}{2}$, 虚軸方向に b だけ平行移動したもの.

次に近似解が動く円の中心の座標について考えると、原点周りの天空鳳型の位置関係の場合で求めた円の中心の座標から、一般の天空鳳型の近似解の動く円の中心の座標は

$$\left(\frac{(a - \frac{a+a'}{2})^2 + (c - \frac{a+a'}{2})^2 + (d-b)^2}{2(c - \frac{a+a'}{2})}, 0 \right) \quad (5.2)$$

と表されることがわかる。さらに、実軸の正の方向に $\frac{a+a'}{2}$ ，虚軸の正の方向に b だけ平行移動して元の位置関係に戻したときを考えると、一般の天空鳳型の場合の E-A 法の近似解は、

$$\left(\frac{(a - \frac{a+a'}{2})^2 + (c - \frac{a+a'}{2})^2 + (d-b)^2}{2(c - \frac{a+a'}{2})} + \frac{a+a'}{2}, b \right) \quad (5.3)$$

を円の中心とし、この点から初期値までの距離を半径とする円の周上を動くことがわかる。

図 9 に、方程式の係数や初期値などを $a=-1, a'=3, b=2, c=5, d=-2, d'=6$ (4.3 節で使った値と同じ値) としたときの E-A 法の近似解の動きを追跡したものを示す。また、(5.3) 式に上の定数を代入すると円の中心は点 (5.5, 2.0)，半径は $\sqrt{(5.5-5)^2 + (2-(-2))^2} = \sqrt{16.25} \div 4.031129$ になる。図 9 の近似解の軌跡からもわかるように、方程式の根と初期値の位置関係が一般の天空鳳型の場合は、E-A 法による近似解は点 (5.5, 2.0) を中心とし半径が約 4.031129 の円の周上を動く。ただし、図 9 において、収束する直前の数回の二つの近似解は各々点線で結んで表示した。二つの近似解の表示の印も変えて表示した。これにより、E-A 法の近似解が反復が進んだとき、数値誤差により方程式の二つの真の根に近似解が収束する様子がよくわかる。

数値誤差の反復回数に対する影響の度合を見るため、表 3 に初期値を微小変化させたときの収束までの E-A 法の反復回数の変化を示す。これは、方程式の係数や初期値を $a=-1, a'=3, b=2, c=5, d=-2+E_m \times (\text{定数}), d'=6+E_m \times (\text{定数})$ としたときのものである。ここで、 E_m は計算機イプシロンを表し、 2.22×10^{-16} 程度の小さな値である。初期値に入れた微小変化の大きさを増すと真の解に収束するまでの E-A 法の反復回数が徐々に減少していることが表からわかる。なお、全ての計算を単精度演算で行なった場合は、E-A 法の反復回数がおおよそ半分の 20 回で収束したことを付記する。

表 3: 初期値を微小変化させたときの E-A 法の反復回数の変化。

	0.0	E_m	$E_m \times 4$	$E_m \times 16$	$E_m \times 32$	$E_m \times 128$
反復回数	39	38	37	35	34	33

5.3 菱形の場合

点 $z_1^{(0)}, z_2^{(0)}$ を初期値として、E-A 法の反復を 1 回行ったときの近似解 $z_1^{(1)}, z_2^{(1)}$ は、(2.5) 式に示す E-A 法と $d-b = \pm(c-a)$ の関係から

$$z_1^{(1)} = c + (2b-d)i, \quad z_2^{(1)} = c + di \quad (5.4)$$

となる。これは初期値が単に入れ替わっただけである。E-A 法の近似解の様子は、数値実験によっても表 4 のように示され、上の考察が妥当であることが確かめられた。

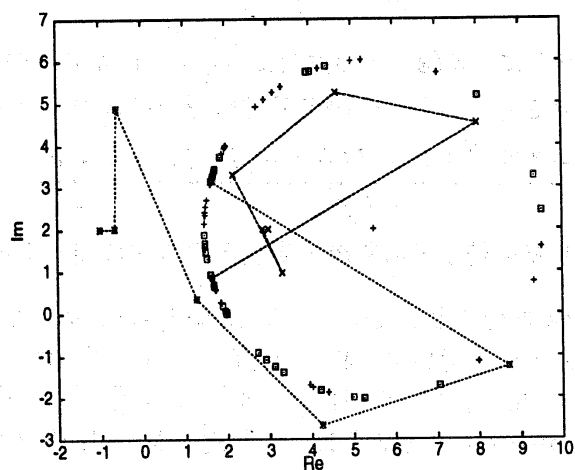


図 9: E-A 法の収束の様子 (反復 39 回で収束).

表 4: 菱形のときの E-A 法の近似解の様子 ($a=-1, b=1, c=2, d=0$ のとき).

反復 回数	$z_1^{(k)}$	$z_2^{(k)}$
1	$2+2i$	2
2	2	$2+2i$
3	$2+2i$	2
4	2	$2+2i$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
99	$2+2i$	2
100	2	$2+2i$

6 まとめ

解くべき代数方程式の根と全根同時反復法である D-K 法や E-A 法の初期値がある特別な位置関係になったとき、反復回数が増えるに従って、理論的に導き出された近似解の動きと数値的に求められた近似解のそれとは全然異なったものになってしまう例と、理論通りの動きを数値的近似解も辿る例の二つのタイプがあることを報告した。

すなわち、天空鳳型の配置の場合は、D-K 法と E-A 法どちらも反復の最初の段階では、理論式から導かれた軌道 (D-K 法は直線、E-A 法は円周) 上を数値的に得られた近似解も動いていく。しかし、反復回数が増えるに従って、数値的に求められた近似解は理論から導き出した近似解とは異なり始め、最終的には方程式の真の根に収束する、という現象が観察された。また、このときの反復回数の多いか少ないかは数値誤差の大きさに依ることも明らかになった。

一方、菱形の配置の場合は、理論的な考察から、D-K 法は第 1 回目の近似解が等しくなるためそれ以後の計算は不可能になり、E-A 法では二つの初期値が反復ごとに交互に入れ替わる近似解になる、ことが分かった。また、数値計算においても同様の現象が起こることが確認された。

謝辞

本研究を遂行するにあたり、貴重な論文の入手の便宜や情報をお寄せいただいた日本大学 生物資源科学部教授 五十嵐正夫氏、ブルガリア科学アカデミー S. Markov 教授、ドイツ Karlsruhe 大学 R. Weiss 博士 (教授資格) に心より感謝の意を表する。また、Durand-Kerner 法および Ehrlich-Aberth 法の大域的収束性について、有益なるコメント並びに関係する論文を多数送っていただいた名古屋大学教授 杉原正顯氏に深い感謝の意を表する。

参考文献

- [1] Aberth, O., Iteration methods for finding all zeros of a polynomial simultaneously, Math. Comp., 27(1973), 339-344.
- [2] Dochev, K., An alternative method of Newton for simultaneous calculation of all the roots of a given algebraic equations (Bulgarian), Phys. Math. J. Bulgar. Acad. Sci., 5(1962), 136-139.
- [3] Durand, E., Solutions numériques des Équations Algébriques, Tom I & II, Masson, Paris, 1960.
- [4] Ehrlich, L.W., A modified Newton method for polynomials, Comm. ACM, 10(1967), 915-920.
- [5] Green, M.W., Korsak, A.J., Pease, M.C., Problem 75-14, Simultaneous Iteration towards All Roots of a Complex Polynomial, SIAM Review, 18(1976), 501-502. (注: 解答は R.D. Small による)
- [6] 五十嵐正夫, 代数方程式に対する高次大域的解法と数値的非収束性, 情報処理学会論文誌, 31(1990), 677-682.
- [7] Kerner, I.O., Ein Gesamtschrittverfahren zur Berechnung der Nullstellen von Polynomen, Numer. Math., 8(1966), 290-294.
- [8] 渡辺勝正, 並列処理概説, コロナ社, 1991 年, 87-94.
- [9] Weierstrass, K., Neuer Beweis des Satzes, dass jede ganze rationale funktion einer Veränderlichen dargestellt werden kann als ein Produkt aus linearen Funktionen derselben Veränderlichen, ges. Werke, 3(1903), 251-269.
- [10] 山本哲朗, 北川高嗣, 数値解析演習, サイエンス社, 1991, p.61.