1F2-3in1

ブラックボックス関数に対する 2 次収束求根アルゴリズム

A quadratic convergence root-finding algorithm for black-box function

伊藤 伸志
Ito, Shinji

NEC　情報・ナレッジ研究所
NEC　Knowledge Discovery Laboratories

The problem of finding the roots of a given function is an important and fundamental problem. One of the most famous method for this root-finding problem is Newton's method, which achieves quadratic convergence under some assumptions. On the other hand, Newton's method has one major disadvantage; the derivative of the input function must be calculated analytically, which is virtually impossible when the input function is a black-box function. In this paper, we propose a root-finding algorithm not requiring computation of derivative. The proposed algorithm is proved to achieve quadratic convergence under some reasonable assumptions.

1. はじめに

ある関数 f に対し，$f(z)=0$ をみたす z を f の根とよぶ．本研究では，滑らかな関数の根を求める問題を考える．この問題はさまざまな領域に応用をもつ，重要かつ基本的な問題である．たとえば，滑らかな関数 g を目的関数にもつ無制約最適化問題は，適当な仮定のもとで，g の勾配 ∇g の根を求める問題に帰着される．本論文では，特に一変数の複素数値解析関数 $f: D \to \mathbb{C} \quad (D \subseteq \mathbb{C})$ の根を求める手法に着目し，そのような手法を求根アルゴリズムとよぶことにする．

本研究では，有理式補間に基づく新たな求根アルゴリズムを提案する．提案手法の位置づけを表 2. に示す．表が示すように，提案手法は関数 f の微分計算を必要としないため具体形のわからない関数にも適用可能であり，かつニュートン法と同等の収束速度を達成する．

2. 既存手法

ニュートン法は最もよく知られた求根アルゴリズムのひとつである．この方法では，適当な初期解 $z_0 \in D$ を与えたうえで次の更新則にしたがって $z_1, z_2, \ldots$ を計算する：

$$z_i = z_{i-1} - \frac{f(z_{i-1})}{f'(z_{i-1})} \quad (i = 1, 2, \ldots). \tag{1}$$

ここで $f'(z_{i-1})$ は $f(z)$ の $z = z_{i-1}$ における微分とする．この式は $f(z)$ を $z = z_{i-1}$ の周りで一次近似して得られる関数

$$\tilde{f}_i(z) := f(z_{i-1}) + f'(z_{i-1})(z - z_{i-1}) \tag{2}$$

を考え，その根を z_i として定めている，と解釈できる．この方法で得られる数列 $\{z_i\}$ は，適当な仮定のもとで f の根 z^* に二次収束することが知られている．このことから，ニュートン法は非常に高速に収束する手法といえる．

上述のようにニュートン法は，更新則の単純さ・収束の高速さという長所をもつが，その一方で f の微分の計算を必要としており，この点は短所といえる．なぜならば，現実の問題においては関数 f の計算過程が複雑な場合や f の具体的な関数形が与えられていない場合など，f の微分の計算が困難な状況がよくあらわれるからである．

連絡先: 伊藤 伸志，email: s-ito@me.jp.nec.com

表 1: 各手法の比較

	微分 $f'(z)$ の計算	収束比
ニュートン法	× あり	○ 2
セカント法	○ なし	△ 1.618
提案手法	○ なし	○ 2

そのため，f の微分の計算を必要としない求根アルゴリズムがいくつか提案されており，その中でもセカント法は代表的なものとして知られる．セカント法では適当な異なる 2 点の初期解 $z_0, z_1 \in D$ を与えたうえで次の更新則にしたがって $z_2, z_3, \ldots$ を計算する：

$$z_i = z_{i-1} - f(z_{i-1}) \frac{z_{i-1} - z_{i-2}}{f(z_{i-1}) - f(z_{i-2})} \quad (i = 2, 3 \ldots). \tag{3}$$

この漸化式は，ニュートン法の漸化式 (1) の $f'(z_{i-1})$ を f の差分商 $\frac{f(z_{i-1})-f(z_{i-2})}{z_{i-1}-z_{i-2}}$ で置き換えることで導出できる．別の見方からは，$z = z_{i-1}, z_{i-2}$ において f に一致する一次関数（f の一次式補間）

$$\tilde{f}_i(z) := \frac{f(z_{i-1})(z - z_{i-2})}{z_{i-1} - z_{i-2}} + \frac{f(z_{i-2})(z - z_{i-1})}{z_{i-2} - z_{i-1}} \tag{4}$$

を考え，その根を z_i として定めている，とも解釈できる．この手法は微分計算を回避しているという点でニュートン法に優るが，その一方で保証される収束比は $(1+\sqrt{5})/2 \approx 1.618$ であり，収束比 2 のニュートン法に比べ収束速度の面では劣る．

3. 有理式補間に基づく求根アルゴリズム

ニュートン法は一次近似 (2) に，セカント法は一次式補間 (4) に基づいていたのに対し，提案手法は有理式補間に基づく．準備として，有理式補間の定義を導入し，知られている性質を示す．

3.1 有理式補間

有理式とは二つの多項式 $p(z), q(z)$ を用いて $r(z) = p(z)/q(z)$ の形式で表せる関数のことであり，$p(z), q(z)$ がそれぞれ m 次以下，n 次以下の多項式のとき $r(z)$ を (m, n) 型の

有理式とよぶ．m 次以下の多項式全体を $\mathcal{P}_m$ と表記し，(m, n) 型の有理式全体を $\mathcal{R}_{m,n}$ と表記する：

$$\mathcal{P}_m = \{a_0 + a_1 z + \cdots + a_m z^m \mid a_0, a_1, \ldots, a_m \in \mathbb{C}\}, \tag{5}$$

$$\mathcal{R}_{m,n} = \left\{ \frac{p(z)}{q(z)} \mid p(z) \in \mathcal{P}_m, q(z) \in \mathcal{P}_n \setminus \{0\} \right\}. \tag{6}$$

関数 $f : D \to \mathbb{C}$ と，相異なる $m + n + 1$ 個の標本点 $s_1, s_2, \ldots, s_{m+n+1} \in D$ に対し，ある (m, n) 型の有理式 $r(z) \in \mathcal{R}_{m,n}$ がその標本点上で $f(z)$ に一致する，つまり

$$f(s_j) = r(s_j) \quad (j = 1, 2, \ldots, m + n + 1) \tag{7}$$

が成り立つとき $r(z)$ を f の $\{s_j\}$ 上 (m, n) 型有理式補間とよぶ．

$\{(s_j, f(s_j))\}_{j=1}^{m+n+1}$ が与えられたとき，f の (m, n) 型有理式補間 r は線形方程式を通して求めることができる．具体的には，

$$f(s_j)(b_0 + b_1 s_j + \cdots + b_n s_j^n) = a_0 + a_1 s_j + \cdots + a_m s_j^m \tag{8}$$

$$(j = 1, 2, \ldots, m + n + 1), \quad (b_0, \ldots, b_n) \neq (0, \ldots, 0)$$

を $a_0, \ldots, a_m, b_0, \ldots, b_n$ についての方程式と見なして解き，(ただし $(b_0, \ldots, b_n) \neq (0, \ldots, 0)$ なるものを求める）その解から

$$r(z) = \frac{a_0 + a_1 z + \cdots + a_m z^m}{b_0 + b_1 z + \cdots + b_n z^n} \tag{9}$$

で r を定めればよい．一般に方程式 (8) の解は一意には定まらないが，方程式 (8) は非自明な解（$a_0 = \cdots = a_m = b_0 = \cdots = b_n = 0$ 以外の解）をもち，それが導く有理式 (9) は一意に定まることが知られている [3, 4].

補間有理式 r は関数 f の近似と見なすことができ，この近似の精度・漸近的性質については [1, 2] などの中で解析されている．とくに，関数の解析性などの仮定のもとで，標本点の密度分布を固定したうえで標本点の個数を増やしたとき，ある領域上で r は f に一次収束することが示されている．

3.2 提案アルゴリズム

提案手法では，適当な k 個の相異なる初期解 $z_0, z_1, \ldots, z_{k-1}$ ($k \geq 2$) を与えたうえで，次の規則で逐次的に $z_k, z_{k+1}, \ldots$ を定める：$i = k, k+1, \ldots$ に対し，

1. $r_i(z)$ を $f(z)$ の $\{z_0, z_1, \ldots, z_{i-1}\}$ 上 $(1, i-2)$ 型有理式補間とする．
2. z_i を $r_i(z)$ の根とする．

各 i について z_i を計算するには，$a_0^{(i)}, \ldots, a_{i-2}^{(i)}, b_0^{(i)} + b_1^{(i)}$ についての一次方程式

$$f(z_j) a_0^{(i)} + \cdots + f(z_j) z_j^{i-2} a_1^{(i-2)} = b_0^{(i)} + z_j b_1^{(i)} \tag{10}$$

$$(j = 0, \ldots, i-1)$$

を解き，その解をもとに $z_i = -b_0^{(i)}/b_1^{(i)}$ とすればよい．この方法での z_i の計算は $O(L + i^3)$ 時間で実行可能である．ここで L は f の関数値の一回の評価に必要な計算時間をあらわす．提案手法で得られる数列は次の性質をもつ．

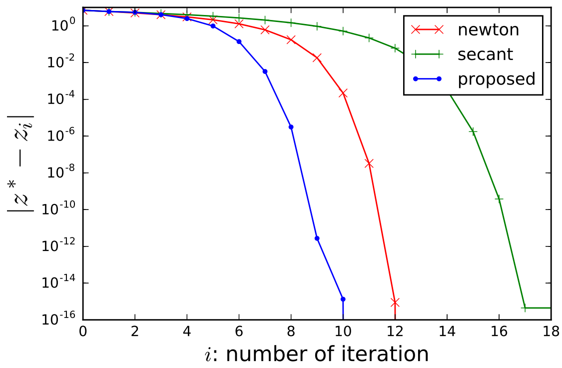

図 1: 3 手法における解の収束速度．各ステップ i での出力解 z_i と厳密解 z^* の差の絶対値を片対数グラフで表示している．

定理 1 (本研究)．$f : D \to \mathbb{C}$ （$D \subseteq \mathbb{C}$）を解析関数とし，$z^* \in D$ を f の重複度 1 の根とする．$z_0, z_1, \ldots, z_k \in D$ を z^* の十分近くにとったとき，各 i において 方程式 (10) の非自明な解は $b_1^{(i)} \neq 0$ をみたし，得られる数列 $\{z_i\}$ は z^* に二次収束する．

この定理は，適当な仮定のもとで，提案手法で得られる数列がニュートン法と同等の収束比をもつことを意味する．

4. 計算機実験

本節では，計算機実験によるニュートン法，セカント法，提案手法の 3 手法の比較の結果を示す．実験では次の解析関数

$$f(z) = \exp(z) - 5 - 5z$$

に対し，3 手法を適用した．ニュートン法での初期解は $z_0 = 10$ と定め，さらにニュートン法で求まる z_1 の値をもちいて $[z_0, z_1]$ を定めてこれをセカント法・提案手法の初期解とした．

実験により得られた数列の振る舞いを図 1 に示す．ニュートン法・提案手法で得られる数列はセカント法のそれより高速に収束していることが読み取れる．

参考文献

[1] E. B. Saff. An extension of Montessus de Ballore's theorem on the convergence of inter- polating rational functions. *J. Approximation Theory*, 6:63–67, 1972.

[2] E. B. Saff and V. Totik. *Logarithmic Potentials with External Fields*, volume 316 of *Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften*. Springer-Verlag, Berlin, 1997.

[3] L. N. Trefethen. *Approximation Theory and Approximation Practice*. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, 2013.

[4] J. L. Walsh. *Interpolation and Approximation by Rational Functions in the Complex Domain*. Fourth edition. American Mathematical Society Colloquium Publications, Vol. XX. American Mathematical Society, Providence, R.I., 1965.