数理解析研究所講究録 1395 巻 2004 年 198-204

一変数代数方程式の行列固有値解法について

村上 弘

MURAKAMI HIROSHI

東京都立短期大学 経営情報学科

TOKYO METROPOLITAN COLLEGE, MANAGEMENT AND INFORMATION*

要約: monic な一変数代数方程式の解法を、対応する一般化随伴行列の行列固有値の数値解法に帰着させる方法の周辺について考察を行なった。全零点が既知の多項式 $P(x)$ による方程式 $f(x)=0$ の条件改善の前処理 (pre-conditioning) と見なせる定式化を取り上げる。$f(x)/P(x)$ の部分分数分解は、方程式 $f(x)=0$ の係数と $P(x)$ の零点から有理的に求められ、$f(x)$ に対応する一般化随伴行列の要素は、部分分数分解の係数から直ちに導ける。$f(x)$ の零点と $P(x)$ の零点とのずれの上限を与える Smith の定理は、$f(x)/P(x)$ の部分分数分解から容易に導かれる。代数方程式の標準的数値解法の Durand-Kerner 法は、「前回の近似根を $P(x)$ の零点に置いて得られる一般化随伴行列の対角近似の固有値を新しい近似根に採用する反復法」と解釈できる。部分分数分解の式に対し直接に摂動展開近似や Newton-Raphson 法を用いて反復的に方程式の近似根を得る試みについても説明する。

1 部分分数分解の係数の計算

相異なる M 個の分点を $\alpha_1,\cdots,\alpha_M$、各分点の重複度を $m_1,\cdots,m_M$、重複度の和 $\sum_{p=1}^{M} m_p$ は多項式 $f(x)$ の次数 n に等しいとする。重複度を込めた因子の積を $P(x)=\prod_{p=1}^{M}(x-\alpha_p)^{m_p}$ とするとき、部分分数分解 $f(x)/P(x)=1+\sum_{p=1}^{M}\sum_{\ell=1}^{m_p}\tau_{\alpha_p,\ell}/(x-\alpha_p)^{\ell}$ の係数 $\tau_{\alpha_p,\ell}$ は以下のように求めることが出来る。

> $f(x)/(P(x)/(x-\alpha_p)^{m_p})$ の $x=\alpha_p$ を中心とする Taylor 展開を (m_p-1) 次の部分まで求めたとすれば、k 次の係数が τ_{α_p,m_p-k} ゆえ、多項式 $f(x)$ と $P(x)/(x-\alpha_p)^{m_p}$ の $x=\alpha_p$ を中心とする展開を各々(m_p-1) 次まで取って割算で商の Taylor 展開を (m_p-1) 次まで求めれば良い。

一層具体的に係数を表してみる。有理関数 $\psi_p(x)\equiv f(x)/(P(x)/(x-\alpha_p)^{m_p})$ を定義すると、$\tau_{\alpha_p,m_p-k}=\psi_p^{(k)}(\alpha_p)/k!\,,k=0,\cdots,m_p-1$ である。$B_p(x)=\frac{P(x)}{(x-\alpha_p)^{m_p}}=\prod'_{q(\neq p)}(x-\alpha_q)^{m_q}$, $G_p(x)\equiv\frac{d}{dx}\log B_p(x)=\sum'_{q(\neq p)}\frac{m_q}{x-\alpha_q}$ と置き、$k=0,\cdots,(m_p-1)$ に対して $\psi_p(x)\equiv f(x)/B_p(x)$ の導関数を計算すると $\tau_{\alpha_p,m_p-k}=(1/k!)\psi_p^{(k)}(\alpha_p)$ から係数 $\{\tau_{\alpha_p,\ell}\}$ が求められる。

$\psi_p(x)$ の導関数の計算の便利の為に、$\psi_p^{(k)}(x)\equiv\phi_p^{[k]}(x)/B_p(x)$ と置いて $\phi_p^{[k]}(x)$ を導入する。(但し ϕ の肩の $[k]$ は添字であって微分の階数の意味ではない。) 関係 $\phi_p^{[0]}(x)=f(x)$ から始め、帰納的な関係 $\phi_p^{[k+1]}(x)=(\frac{d}{dx}\phi_p^{[k]}(x))-\phi_p^{[k]}(x)G(x)$ を利用して $\phi_p^{[k]}(x)$ が求まる。$f^{(k)}(x)$ は $f(x)$ の k-階導関数、$G_p^{(k)}(x)$ は $G_p(x)$ の k-階導関数で $G_p^{(k)}(x)=(-1)^k k!\sum'_{q(\neq p)}\frac{m_q}{(x-\alpha_q)^{k+1}}$ 。係数 $\{\tau_{\alpha_p,\ell}\}$ は $\tau_{\alpha_p,m_p-k}=(1/k!)\psi_p^{(k)}(\alpha_p)$ で、式中の x に α_p を代入して $\psi_p^{(k)}(x)=\phi_p^{[k]}(x)/B_p(x)$ により計算できる。$\phi_p^{[k]}(x)$ の表式の最初の 5 個 (重複度

*murakami@tmca.ac.jp

5 への対応が可能) までを具体的に書くと:

$$\phi_p^{[0]}(x) = f(x)\ ,\ \ \phi_p^{[1]}(x) = f^{(1)}(x) - G_p(x)f(x)\ ,$$
$$\phi_p^{[2]}(x) = f^{(2)}(x) - 2G_p(x)f^{(1)}(x) + (G_p^2(x) - G_p^{(1)}(x))f(x)\ ,$$
$$\phi_p^{[3]}(x) = f^{(3)}(x) - 3G_p(x)f^{(2)}(x) + 3(G_p^2(x) - G_p^{(1)}(x))f^{(1)}(x) + (-G_p^3 + 3G_p^{(1)}(x)G_p(x) - G_p^{(2)}(x))f(x)\ ,$$
$$\phi_p^{[4]}(x) = f^{(4)}(x) - 4G(x)f^{(3)}(x) + (6G_p^2(x) - 6G_p^{(1)}(x))f^{(2)}(x) + (-4G_p^3(x) + 12G_p^{(1)}(x)G_p(x) - 4G_p^{(2)}(x))f^{(1)}(x) + (G_p^4(x) - 6G_p^{(1)}(x)G_p^2 + 4G_p^{(2)}(x) + 3(G_p^{(1)}(x))^2 - G_p^{(3)}(x))f(x)\ .$$

2 一般化 Lagrange 補間と一般化随伴行列

monic な n 次方程式を $f(x)=0$、一般化 Lagrange 補間の相異なる M 個の分点を $\alpha_1,\cdots,\alpha_M$、各分点の重複度を $m_1,\cdots,m_M$、重複度の和 $\sum_{p=1}^{M} m_p$ は n に等しいとする。重複度を込めた因子の積を $P(x)=\prod_{p=1}^{M}(x-\alpha_p)^{m_p}$ とすると、部分分数分解 $f(x)/P(x)=1+\sum_{p=1}^{M}\sum_{\ell=1}^{m_p}\tau_{\alpha_p,\ell}/(x-\alpha_p)^{\ell}$ の分子の係数は f の係数と M 個の分点とから有理的に求められる。次に合計 n 個の (多重) 極因子 $\varphi_{\alpha_p,\ell}(x)\equiv 1/(x-\alpha_p)^{\ell}$, $1\le\ell\le m_p$ を基底にとる。そのとき定数 1 は mod$f(x)$ で ($P(x)$ を乗じて mod $f(x)$ で法をとれば同値になるという意味で) 基底の線形結合によって $1=-\sum_{q=1}^{M}\sum_{j=1}^{m_q}\tau_{\alpha_q,j}\varphi_{\alpha_q,j}$ と書けることに注意する。x を乗じる作用の基底上の線形表現は:

- $\ell\ge 2$ のとき $x\cdot\varphi_{\alpha_p,\ell}=\frac{x}{(x-\alpha_p)^{\ell}}=\frac{\alpha_p}{(x-\alpha_p)^{\ell}}+\frac{1}{(x-\alpha_p)^{\ell-1}}=\alpha_p\cdot\varphi_{\alpha_p,\ell}+1\cdot\varphi_{\alpha_p,\ell-1}$.
- $\ell=1$ のとき $x\cdot\varphi_{\alpha_p,1}=\frac{x}{x-\alpha_p}=\frac{\alpha_p}{x-\alpha_p}+1=\alpha_p\cdot\varphi_{\alpha_p,1}-\sum_{q=1}^{M}\sum_{j=1}^{m_q}\tau_{\alpha_q,j}\cdot\varphi_{\alpha_q,j}$.

となる。変換の行列 T の要素はこれから求まる。多項式の基底での表現に移るには、基底 $\varphi_{\alpha_p,\ell}$ に $P(x)$ を乗じると、一般化 Lagrange 補間多項式 $B_{\alpha_p,\ell}(x)$ が得られ、x を表現する行列 T は不変であることが容易に分かる。あるいは最初から $P(x)$ を乗じた形での基底の関係式を考えていると見なすとよい。

2.1 分点が原点で重複度 n の場合

$P(x)=x^n$ に相当し、T は副対角が全て 1 の下 Hessenberg 形行列で、最後の行は $f(x)$ の係数の符号を変えたもので、古典的な随伴行列。x を乗じる作用を制約 $f(x)=0$ の下で線形独立な単項多項式の基底 $\{1,x,x^2,\cdots,x^{n-1}\}$ 上で線形表現したもので、基底の数値的な線形独立性は $x=0$ と $x=\infty$ の近傍で高い。

古典的随伴行列 (Companion matrix) の固有値を、非対称行列に balancing 適用後に QR-反復法によって解く方法を適用する場合の後退誤差解析は既に行った [1]。古典的随伴行列を利用する一変数代数方程式の数値解法は、後退誤差解析の意味で極めて安定である。高次の場合 (数百～など) でも、固定精度の浮動小数点数表現での計算の範囲では方程式の残差が小さいという意味での一応妥当な数値近似根が得られる。

2.2 分点が相異なる場合

相異なる n 個の分点 $\alpha_1,\cdots,\alpha_n\in$C を採り $P(x)=\prod_p(x-\alpha_p)$ を作ると、$f(x)/P(x)$ の部分分数分解で分母 $(x-\alpha_j)$ に対応する分子の係数は $\tau_j\equiv f(\alpha_j)/P'(\alpha_j)$。$x$ の表現行列 T は $t_{k,j}=\alpha_j\,\delta_{k,j}-\tau_j$ となり、T の固有値が $f(x)=0$ の根である。T の対角近似の固有値を根の近似値に採用することが Durand-Kerner 法の反復 1 回に一致する。

$f(x)=0$ の制約の下で n 個の相異なる分点上の Lagrange 補間多項式 $P(x)/(x-\alpha_j)$ を基底に採って x を乗じる作用を表現する行列が T で、基底は分点 α_k の近傍での数値的線形独立性が高い。

分点集合から一般化随伴行列の固有値として近似計算で求めた根を新たなLagrange補間多項式の分点集合と置き、その新しい分点集合から(必要なだけの高精度計算を用いて)一般化随伴行列を再度構成、という反復操作を行えば近似度を必要に応じ上げながら近似根全てを確実に求められる算法が得られる[2][3]。一般化随伴行列は反復に伴い次第に対角行列に収束する。収束する一般化随伴行列の固有値を反復毎に求めるので、前回の情報をQR法のシフト量の決定に利用すれば計算量をかなり低減できるが、それでもn-次行列のQR-反復法によるSchur分解は$O(n^3)$の計算量なので、反復1回当たりの計算量が$O(n^2)$であるDurand-Kerner法(行列の対角近似に該当)に比べ、計算量や必要な記憶量の面でかなり不利である。ほとんどの場合、最初の一回だけは数値解法により古典随伴行列の固有値の近似根を得て、以降はDurand-Kerner法の反復を(演算精度を必要なだけ上げながら)適用すればよく、(Durand-Kerner法の反復の補正量のn倍がSmithの円の半径だから)必要に応じてSmithの定理を用いると近似根の誤差限界を評価でき、Durand-Kernerの反復による計算の進行の様子を監視することが出来る。

方程式$f(x)=0$の根に重根がある場合(これは仮に正確なGCD計算が行なえれば除外することもできる)、あるいは極端な近接根を持つ場合については、Lagrange補間多項式の分点を移動させて根に近づけていくことで次第に一般化随伴行列の条件を向上できるが、分点相互が極端に近づくと、固定精度の浮動小数点数による演算では数値的問題が生じ、精度の良い根や誤差の限界を求めることが困難になる。むしろ積極的に重複した分点を許す定式化が数値的扱いには有利である(参考:[12])。

2.3 分点に重複を許す場合

最も一般化された随伴行列の行列要素は、相異なる分点に基づいたLagrange補間多項式を基底にとった「一般化随伴行列」とxの単項式を基底にとった通常の「古典的な随伴行列」との混合型になる。

分点α_pの分点の重複度をm_pとする。因子の積を$P(x)=\prod_{p=1}^{M}(x-\alpha_p)^{m_p}$、部分分数分解を$f(x)/P(x)=1+\sum_{p=1}^{M}\sum_{k=1}^{m_p}\tau_{\alpha_p,k}/(x-\alpha_p)^k$とする。そのとき表現行列$T$は$(p,k)$の組で指定される分母$(x-\alpha_p)^k$に対応する$m_p$個の行を持ち、その減少する極位数の列$k=m_p,\cdots,2$に対応する$(m_p-1)$個の行は対角要素が$\alpha_p$、右副対角要素が1で他は0となる。位数$k=1$に対応する行は$(q,j)$の組で指定される分母$(x-\alpha_q)^j$に対応する列に対して$-\tau_{\alpha_q,j}$を置き、さらに対角位置に$\alpha_p$を加えたものになる。

分点の重複度が$\{3,2,1\}$の例

$f(x)$をmonicな6-次多項式とする。分点を三点α,β,γとし、それぞれの重複度を3,2,1とする。$P(x)=(x-\alpha)^3(x-\beta)^2(x-\gamma)$と置いて、$f(x)/P(x)$の部分分数分解の各極の係数を$\{\tau_{\alpha,3},\tau_{\alpha,2},\tau_{\alpha,1},\tau_{\beta,2},\tau_{\beta,1},\tau_{\gamma,1}\}$とする。基底の順序を極の係数の添字に合わせて$\{(\alpha,3),(\alpha,2),(\alpha,1),(\beta,2),(\beta,1),(\gamma,1)\}$と採るとき、$x$を乗じる線形表現行列$T$は、

$$\begin{bmatrix} \alpha & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -\tau_{\alpha,3} & -\tau_{\alpha,2} & \alpha-\tau_{\alpha,1} & -\tau_{\beta,2} & -\tau_{\beta,1} & -\tau_{\gamma,1} \\ 0 & 0 & 0 & \beta & 1 & 0 \\ -\tau_{\alpha,3} & -\tau_{\alpha,2} & -\tau_{\alpha,1} & -\tau_{\beta,2} & \beta-\tau_{\beta,1} & -\tau_{\gamma,1} \\ -\tau_{\alpha,3} & -\tau_{\alpha,2} & -\tau_{\alpha,1} & -\tau_{\beta,2} & -\tau_{\beta,1} & \gamma-\tau_{\gamma,1} \end{bmatrix}.$$

2.4 実係数方程式の場合

実係数方程式の場合を考察する。(古典的)随伴行列は実Hessenberg形なので、疎性を生かし適切にbalancingした後にdouble-QR法を行う方法が固有値計算に採用できるが、数値根の近似を改良するた

め相異なる分点を根付近に配置し、実の一般化随伴行列を得る方法を導く。

monic な n 次の実方程式 $f(x)=0$ に対し、複素平面上 $n=s+2t$ 個の相異なる分点を設け、実の分点が s 個、虚で複素共役な分点の組を t 個とする。$\alpha_i \in \mathrm{R}, i=1,\cdots,s$; $\beta_j, \beta_j{}^*, j=1,\cdots,t$, $\mathrm{Im}(\beta_j)>0$ 。基底関数 $\varphi_i(x)=\frac{1}{x-\alpha_i}$, $\phi_j^{(A)}(x)\equiv\frac{1}{2}(\frac{1}{x-\beta_j}+\frac{1}{x-\beta_j{}^*})$, $\phi_j^{(B)}(x)\equiv\frac{1}{2i}(\frac{1}{x-\beta_j}-\frac{1}{x-\beta_j{}^*})$ を用いれば x を乗じる作用の表現行列 T は実行列になる。(詳細省略) あるいは複素共役対の分点に対応する基底に $\phi_j^{(0)}(x)\equiv\frac{1}{(x-\beta_j)(x-\beta_j{}^*)}$, $\phi_j^{(1)}(x)\equiv\frac{x}{(x-\beta_j)(x-\beta_j{}^*)}$ を用いることも出来る。実非対称行列を Householder 法により Hessenberg 化の後、double-QR 法を用いて固有値を計算することが出来る。

3 非対称行列の固有値の計算法

行列の数値的固有値解法は連立一次方程式と同様に既に膨大な研究がなされているが、簡便に非対称複素行列の固有値を全て求めるのには、例えば行列の疎性に適合した balancing と組み合わせて Francis の QR-法 [14] を、あるいは P.J.Eberlein の Norm Reducing Jacobi 法 [14] を利用出来る。Jacobi 法は、行列要素への参照パターンから記憶参照の局所性が低く、行列の次数が大きいとかなり不利である。但し、非対角成分が小さい場合には収束が早い。代数方程式の解法として行列固有値の解法で QR 法など行列の変形に基づく数値計算法を利用する場合に共通の難点は、「行列を保持する為に $O(n^2)$ の記憶量が必要で、全固有値を求めるのには $O(n^3)$ の計算量が必要」なことである。固有値の一部分が欲しい場合などには、行列 T の構造を利用した反復系解法も考察すべきであろう。

T の balancing について

分点が相異なる場合、分点の組 $\{\alpha\}$ を固定すると、n 個の係数 $\{\tau\}$ で方程式の根が決まるが、複素対角行列 D で T を相似変換 $T\to\widetilde{T}=DTD^{-1}$ する balancing を行うと、$t_{k,j}=\alpha_k\delta_{k,j}-\tau_j \to \widetilde{t}_{k,j}=\alpha_k\delta_{k,j}-\tau_j\,(d_k/d_j)$ となる。例えば $\tau_j\neq 0$ のとき $d_j=(\tau_j)^{1/2}$ とし、$\tau_j=0$ もしくは丸め誤差 ε 程度のときには $d_j=(\varepsilon)^{1/2}$ とすると、$\tau_j\,(d_k/d_j)=(\tau_k\tau_j)^{1/2}$ となり、$\widetilde{T}$ は (複素) 対称行列になる。特に分点 $\{\alpha\}$ が実数で $f(x)$ も実係数多項式のとき、全ての τ_j が同符号である場合 (即ち分点を値の順に並べたとき分点上での $f(x)$ の符号が毎回反転する場合) には $\widetilde{T}$ が実対称な行列であることがわかる。

T の非対角要素の絶対値の 2 乗和と $\widetilde{T}$ の非対角要素の絶対値の 2 乗和の差は $n\|\tau\|_2^2-\|\tau\|_1^2\geq 0$(等号は全成分の大きさが等しい時)、あるいは T の非対角要素の絶対値の 1 乗和と $\widetilde{T}$ の非対角要素の絶対値の 1 乗和の差は $n\|\tau\|_1-\|\tau\|_{1/2}\geq 0$(等号は全成分の大きさが等しい時)。いずれの尺度でも T よりも $d_j=|\tau_j|^{1/2}$ で balancing された複素対称行列 $\widetilde{T}$ の方が非対角性が小さい。

4 部分分数展開と Smith の定理

4.1 分点に重複のない場合

部分分数分解を $f(x)/P(x)=1+\sum_{p=1}^{n}\tau_p/(x-\alpha_p)$ 。根 x が分点と異なるなら、$1=\left|\sum_p \tau_p/(x-\alpha_p)\right|$ から $1\leq\sum_p|\tau_p/(x-\alpha_p)|$ 。いま 0 を省いた分子 τ_p の個数を $n^*(\leq n)$ と置く。$n^*=0$ なら $f(x)/P(x)\equiv 1$ で x は分点に一致するから $n^*\neq 0$ としてよい。すると、$|\tau_p/(x-\alpha_p)|\geq 1/n^*$、即ち $|x-\alpha_p|\leq n^*|\tau_p|$ となる添字 p が (無ければ不等式を満たせないから) 必ずある。また更に $1\leq\sum_q|\tau_q/(x-\alpha_q)|\leq(1/\min_q|x-\alpha_q|)\sum_q|\tau_q|$ だから q を $|x-\alpha_q|$ を最小にする添字とすれば、$|x-\alpha_q|\leq\sum_q|\tau_q|=\|\tau\|_1$。また、分点 α_p が根なら、部分分数分解の左辺は $x=\alpha_p$ で有限だから $\tau_p=0$、逆に $\tau_p=0$ なら α_p は根である。よって根 x が分点に一

致する場合も、両方の不等式を満たす添字があることが容易にわかる。

以上から方程式の任意の根 x に対して、$|x-\alpha_p|\leq n^*|\tau_p|$ となる添字 p と $|x-\alpha_q|\leq||\tau||_1$ となる添字 q が存在する。即ち $f(x)=0$ の全根は、全ての p について円板:$|x-\alpha_p|\leq n^*|\tau_p|$ を合併させた領域に含まれることがわかる。あるいは全ての q について円板:$|x-\alpha_q|\leq||\tau||_1$ を合併させた領域についても同様である。更に、部分分数展開の分子の係数 $\{\tau\}$ を全部一斉に実数 t 倍に置き換えたものを考え対応する左辺を $F(x,t)/P(x)$ と置くと $F(x,0)=P(x)$, $F(x,1)=f(x)$ である。(今の場合 $F(x,t)\equiv P(x)+t\,(f(x)-P(x))$。) 実数 t を 0 から 1 まで単調連続的に変え、それに伴う各根の軌跡の連続性を考えると、円板 $D_p:|x-\alpha_p|\leq n^*|\tau_p|$ について、Gershgorin 型の根の包含定理:「全円板の合併領域内に全根が含まれる。各連結成分内の根の個数は連結成分を構成する円板の個数に等しい」がわかる。(円板 $D'_q:|x-\alpha_q|\leq||\tau||_1$ についても同様。) 以上で、分点が相異なる場合の Smith の定理 [12] が Gershgorin の定理を経由しない初等的方法で得られた。注意: 係数 $|\tau_p|$ の正確な零判定が出来ない場合 n^* を n とすると Smith 円の半径が増える、$|\tau_p|$ の値が誤差を含む場合には上限値で置き換えると、Smith 円の半径が増えた粗い評価が得られる。

4.2 分点に重複を許す一般の場合

部分分数分解を $f(x)/P(x)=1+\sum_{p=1}^{M}\sum_{k=1}^{m_p}\tau_{\alpha_p,k}/(x-\alpha_p)^k$ とする。分点と異なる根 x に対しては、$1\leq\sum_{p=1}^{M}\left(\sum_{k=1}^{m_p}\left|\tau_{\alpha_p,k}/(x-\alpha_p)^k\right|\right)$ 。M 個ある分点 $\{\alpha_p,p=1,\cdots,M\}$ のうちで、対応する分子の係数 $\tau_{\alpha_p,k},k=1,\cdots,m_p$ が全て 0 であるような分点を省いた個数を $M^*(\leq M)$ とする。$M^*=0$ なら $f(x)/P(x)\equiv1$ で、分点と異なる根が存在しないから $M^*\neq0$ と仮定してよい。すると不等式 $\sum_{k=1}^{m_p}\left|\tau_{\alpha_p,k}/(x-\alpha_p)^k\right|\geq1/M^*$ を満たし、係数 $\tau_{\alpha_p,k},k=1,\cdots,m_p$ の中に 0 ではないものがあるような添字 p が存在する (無ければ元の不等式を満たせない)。

いま簡明の為に $r\equiv|x-\alpha_p|>0$,$a_k\equiv M^*|\tau_{\alpha_p,k}|\geq0$ と置くと、不等式は $g(r)\equiv1-\sum_{k=1}^{m_p}a_k/r^k\leq0$ となる。係数 a_k の中に 0 でないものがあるので、$g(r)$ は単調増加関数で 0 の近傍では $g(r)<0$ だから、$g(r)=0$ は唯一の正根 R_p を持ち、不等式 $g(r)\leq0$ なら $r\leq R_p$、即ち $|x-\alpha_p|\leq R_p$ である。R_p は分点 α_p を中心とする Smith 円の半径である。

方程式 $g(r)=0$ の唯一の正根 R_p は以下のようにして求められる。係数 $\{a_k,k=1,\cdots,m_p\}$ のうち 0 ではないものの個数 m_p^* は仮定から 0 ではない。$1=\sum_{k=1}^{m_p}a_k/R_p^k$ だから、少なくとも $a_k/R_p^k\geq1/m_p^*$ となる添字 k が存在する。その添字 k に対して $R_p\leq(m_p^*a_k)^{1/k}$ だから正根 R_p の上限が $\max_k\{(m_p^*a_k)^{1/k}\}$ で与えられる。関数 $g(r)$ は単調で下に凸だから、Newton-Raphson 法によってこの正根の限界から始めて反復すると、途中の近似値の列は単調に減少しながら常に根の上界を与えつつ、唯一の正根 R_p へ必ず収束する。

注意:係数の厳密な零判定が出来ない場合、M^*,m_p^* の代わりに M,m_p を使うと Smith 円の半径は増加し、より粗い評価が得られる。また $g(r)$ の関数値は ($r>0$ だから) どの係数 a_k に関しても単調減少なので、R_p の値はどの係数 a_k に関しても単調増加である。係数 a_k の値が正確に求まらない場合でも、係数の値を誤差上限から決まる上限値により置き換えれば Smith 円の半径が増加した粗い評価が得られる。

分点 α_p が $f(x)$ の位数 m_p 以上の零点ならば、$f(x)/P(x)$ は $x=\alpha_p$ で極を持たないので、係数 $\{\tau_{\alpha_p,k},k=1,\cdots,m_p\}$ は全て 0 になる。この場合は Smith 円の半径 R_p を 0 と定義する。この定義は、係数 $\{\tau_{p,k},k=1,\cdots,m_p\}$ の中に 0 ではないものがある場合を考え、それらの係数を全て 0 に近づけて極限を取った場合と矛盾しない。(上述の Smith 円の半径の計算で R_p の上限の値 $\max_k\{(m_p^*a_k)^{1/k}\}$ が $a_k\to0,k=1,\cdots,m_p$ の極限では 0 になることからも分かる)

分点 α_p が $f(x)$ の位数 $L(0<L\leq m_p)$ の零点ならば、$f(x)/P(x)$ は $x=\alpha_p$ で m_p-L 位の極を持つので、係数 $\{\tau_{\alpha_p,k}, k=1,\cdots,m_p\}$ は添字 $k=m_p-L$ に対しては 0 でなく、それより大きい L 個の添字 $k=m_p-L+1,\cdots,m_p$ に対しては全て 0 となる。逆に、係数の添字 k を大きい側から順にみて丁度 $L(1<L<m_p)$ 個が連続して 0 なら、α_p は $f(x)$ の丁度 L 位の零点である。この場合の Smith 円の半径 R_p を求めると値は正だから、分点に一致する根 $x=\alpha_p$ に対して $|x-\alpha_p|\leq R_p$ は当然成立する。

まとめると、各分点 α_p を中心とする Smith 円の半径 R_p を求めると、方程式 $f(x)=0$ の全ての根は、いずれかの (周をも含めた) 円板上にある。

(主係数が 0 にならない) 方程式の根はその係数の連続関数なので、ホモトピー的考察を行えば更に強いことが言える。ホモトピーの構成は、$f(x)/P(x)$ の部分分数分解の係数 $\{\tau_{\alpha_p,k}\}$ に対して、t を実のパラメタとして一斉に $\{t^k\tau_{\alpha_p,k}\}$ で置き換えた右辺をつくり、それが $F(x,t)/P(x)$ の分解であると置くと $F(x,0)=P(x)$, $F(x,1)=f(x)$ で、t の値を $t=0$ から $t=1$ まで単調に増大させると分点 p を中心とする Smith 円の半径は tR_p となり単調に増大するので、Gershgorin 型の包含定理: 「全ての円板の合併領域中に全根が含まれる。しかも各連結成分中の根の個数は、連結成分を構成する円板の重み (中心の分点の重複度) の和に等しい」が導ける。このように、不等式を中心としたなるべく簡単な議論で Smith の定理 [12] の主要な結果を得ることが出来る。(Smith 円の半径 R_p は係数 $\{\tau_{\alpha_p,k}, k=1,\cdots,m_p\}$ の絶対値の単調増加関数だから、ホモトピーを構成するのには、係数 $\tau_{\alpha_p,k}$ に t の関数 $h_{p,k}(t)$ を乗じたものを考え、関数 $h_{p,k}(t)$ が広義単調増加で閉区間 $[0,1]$ を $[0,1]$ へ写せば充分である。例えば $h_{p,k}(t)=t$ でもよい。)

5 部分分数分解と分数方程式

分点 α_j が全て異なるとする。$P(x)=\prod_j(x-\alpha_j)$ と置く。monic な n 次方程式 $f(x)=0$ に対し、部分分数分解を $f(x)/P(x)=1+\sum_{j=1}^n\tau_j/(x-\alpha_j)$ とする。係数は $\tau_j=f(\alpha_j)/P'(\alpha_j)$。

x がどの分点とも一致しない方程式の根ならば、分数方程式:$1+\sum_{j=1}^n\tau_j/(x-\alpha_j)=0$ を満たす。x が分点 α_k と一致する元の方程式の根ならば、$\tau_k=0$ なので部分分数分解から添字 k を持つ項は消え、$f(x)=0$ と $P(x)=0$ が共通根を持ち、元の方程式の減次に対応する。

反復的に分点の組 $\{\alpha\}$ を変化させる場合、その分点の組に対応した分子の係数の組 $\{\tau\}$ の中に値 0(もしくは丸め誤差を考慮して 0 とみなせるもの) が生じた場合はその項を積極的に除き、以後その分子に対応する分点は固定してよい。以下ではこの ($f(x)=0$ を $P(x)$ で pre-conditioning を施したと見なせる) 分数方程式を反復法で解くことを試みる。

Newton-Raphson 法による方法

Newton-Raphson 法の利用を考察する。$g(x)\equiv 1+\sum_j\tau_j/(x-\alpha_j)$ と置くと、g の零点を求める Newton-Raphson 法の反復は: $x\leftarrow x-g(x)/g'(x)=x+(1+\sum_j\tau_j/(x-\alpha_j))/(\sum_j\tau_j/(x-\alpha_j)^2)$ となる。近似根から始め、反復して値が収束すれば根が得られる。(但し、$\tau_j\neq 0$ のとき、反復の途中偶然に x が α_j に一致した場合は、x の更新量の分子分母は無限大だが極限値は 0 である。そのため反復が停止するが、これは根ではない。)

いま α_k の近傍での解を求める為に x の初期値を $\alpha_k-\tau_k$ として、Newton-Raphson 反復を 1 回適用したものを式で書くと、$x\leftarrow\alpha_k-\tau_k\left(1-\frac{\sum'_{j(\neq k)}\tau_j/(\alpha_k-\tau_k-\alpha_j)}{1+\tau_k\sum'_{j(\neq k)}\tau_j/(\alpha_k-\tau_k-\alpha_j)^2}\right)$ となる。

複数回の Newton-Raphson 法の反復を行う場合に、$x=\alpha_k-\tau_k\theta$ と置いて θ を定義すると、

$\theta^{(s+1)}\leftarrow\theta^{(s)}\left(1+\frac{1-\theta^{(s)}\left(1+\sum'_{j(\neq k)}\tau_j/(x^{(s)}-\alpha_j)\right)}{1+\tau_k(\theta^{(s)})^2\sum'_{j(\neq k)}\tau_j/(x^{(s)}-\alpha_j)^2}\right)$, $x^{(s+1)}\leftarrow\alpha_k-\tau_k\theta^{(s+1)}$ となる。

摂動的方法

$\{\tau\}$ の大きさが充分小さい場合に摂動的扱いを試みる。α_k 付近の解 x を求める為に、$(x-\alpha_k)$ を乗じた関係式: $x = \alpha_k - \tau_k - (x-\alpha_k)\sum'_{j(\neq k)} \tau_j/(x-\alpha_j)$ から逐次近似: $x^{(s+1)} = \alpha_k - \tau_k - (x^{(s)} - \alpha_k)\sum'_{j(\neq k)} \tau_j/(x^{(s)}-\alpha_j)$ を得る。τ の 1 次近似では $x^{(1)} = \alpha_k - \tau_k$ となり、Durand-Kerner 反復に等価。次に τ の 2 次近似では $\theta^{(2)} \equiv 1 - \sum'_{j(\neq k)} \tau_j/(x^{(1)}-\alpha_j)$, $x^{(2)} = \alpha_k - \tau_k\theta^{(2)}$. さらに 3 次近似では $\theta^{(3)} \equiv 1 - \theta^{(2)} \sum'_{j(\neq k)} \tau_j/(x^{(2)}-\alpha_j)$, $x^{(3)} = \alpha_k - \tau_k\theta^{(3)}$ などとなる。

まとめると 1 次で $\theta^{(1)} \equiv 1$, $x^{(1)} = \alpha_k - \tau_k\theta^{(1)}$ から始めて、$(s+1)$ 次では s 次の $\theta^{(s)}, x^{(s)}$ を用いて: $\theta^{(s+1)} \equiv 1 - \theta^{(s)} \sum'_{j(\neq k)} \tau_j/(x^{(s)}-\alpha_j)$, $x^{(s+1)} = \alpha_k - \tau_k\theta^{(s+1)}$ となる。

参 考 文 献

[1] Alan Edelman and H. Murakami, "Polynomial Roots from Companion Matrix Eigenvalues", Math. Comp.,v64,no.210,p763-776,April,(1995).

[2] Steven Fortune, "Polynomial root finding using iterated eigenvalue computation", Proceedings of the ACM SIGSAM,ISSAC 2001,pp.121-128. (本論文に内容が近い)

[3] Steven Fortune, "Convergence analysis of an iterated eigenvalue polynomial root finding algorithm", URL="citeseer.nj.nec.com/469859.html".

[4] Gene H.Golub and Charles F.Van Loan, "Matrix Computations", 3rd ed., The Johns Hopkins University Press, 1996. (数値行列算法全般の標準的教科書)

[5] Peter Henrici, "Applied and Computational Complex Analysis, Vol.1" John Wiley and Sons Inc.,1974.(Chap.6 – Polynomials 参照)

[6] Dinesh Manocha, "Algorithms for computing selected solutions of polynomial equations", J.Symbolic Computaion,vol.11,pp.1-20,1994. (多変数)

[7] Dinesh Manocha and Shankar Krishnan, "Solving Algebraic Systems using Matrix Computations" SIGSAM Bulletin,vol.30,no.4,pp.4-21,1996.

[8] Arnold Neumaier, "A Gerschgorin-type theorem for zeros of polynomials".

[9] V.Pan, "Solving a polynomial equation: some history and recent progress", SIAM Review,vol.39,no.2,pp.187-220,1997. (一変数代数方程式の数値解法の総合報告)

[10] Miodrag S.Petkovic, Carsten Carstensen and Miroslav Trajkovic, "Weierstrass formula and zero-finding methods(1995)", URL="citeseer.nj.nec.com/petkovic95weierstrass.html".

[11] W.H.Press, B.P.Flannery, S.A.Taukolsky and W.T.Vetterling, "Numerical Recipes in Pascal - The Art of Scientific Computing", Cambridge University Press, 1989.

[12] B.T.Smith, "Error bounds for the zeroes of a polynomial based upon Gershgorin's theorem", JACM, 17:661-674,1970.

[13] J. Wilkinson, "The Algebraic Eigenvalue Problem", Clarendom Press,Oxford,1965. (行列固有値問題全般の参考書)

[14] J.H.Wilkinson and C.Reinsch,"Handbook for Automatic Computation Vol.II, Linear Algebra", Springer-Verlag,1971. (計算線形代数の歴史上重要な論文集. Francis QR 法、double QR 法、Norm Reducing Jacobi 法の Algol-60 コード)