行列ランベルト W 関数の値を含む区間行列の数値計算

岩手大学・理工学部 * 宮島　信也
Shinya Miyajima
Faculty of Science and Engineering, Iwate University

1 序

$a \in \mathbb{C}$ に対するランベルト W 関数は方程式 $we^w = a$ の解である．$a \neq 0$ のとき, この解は可算無限個存在し, $a = 0$ のとき, ちょうど 1 つ ($w = 0$) 存在する．$w \neq -1$ なる任意の解は解析関数に拡張することができる．この解析関数は分岐切断と呼ばれる直線を除いた $\mathbb{C}$ 上で定義される．このような関数はランベルト W 関数の分枝と呼ばれる．ランベルト W 関数が定義された背景ならびにその応用については, [1] を参照されたい．本稿では, 分枝の番号付け, 表記, 分岐切断について [1, Section 4] に従う．$k \in \mathbb{Z}$ に対して, 第 k 分枝は $W_k(a)$ と表記される．ここで, $W_0(z)$ は主分枝と呼ばれる．分岐切断 $\mathbb{B}_k$ は $k = 0$ のとき $\mathbb{B}_k = (-\infty, -1/e]$, $k \neq 0$ のとき $\mathbb{B}_k = (-\infty, 0]$ である．各 $a \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ につき, 集合 $\{W_k(a) : k \in \mathbb{Z}\}$ は $we^w = a$ の解全体の集合である．なお, $a = 0$ のときには解は一意であり, $W_0(0) = 0$ である．よって, $k \neq 0$ に対して $W_k(0)$ を定義することはできない．すなわち, 0 は $W_k(z)$, $k \neq 0$ の特異点である．

ランベルト W 関数の応用のひとつは遅延微分方程式の解を記述できることである．次の定数係数の遅延微分方程式を考える．

$$y'(t) = ay(t-1), \quad t \geq 0, \quad a \in \mathbb{C}, \quad \text{ただし} \quad y(t) = f(t), \quad t \in [-1, 0]$$

この方程式が定数 $c \in \mathbb{C}$ に対して $y(t) = e^{st}c$ という形の解をもつならば, $s = W_k(a)$ である．また, この方程式の一般解を $y(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{W_k(a)t} c_k$ のように記述できる [1,

* 〒020-8551 岩手県盛岡市上田 4-3-5

Section 2]. ここで, $c_k \in \mathbb{C}$, $k \in \mathbb{Z}$ は関数 f により決定される.

ジョルダン標準形を利用した行列関数の定義 (例えば [4, Definition 1.2]) を用いて, ランベルト W 関数を行列関数に拡張することができる. $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ に対するランベルト W 関数は行列方程式 $We^W = A$ の解となる. A に対するランベルト W 関数の固有値は A の固有値に対するランベルト W 関数である (例えば [4, Theorem 1.13]). $\lambda(A)$ を A の固有値全体の集合とするとき, 本稿では, $\lambda(A) \cap \mathbb{B}_k = \emptyset$ の場合に焦点を当てる.

A の各ジョルダンブロックに所属する固有値に対して分枝を指定することにより, 行列ランベルト W 関数を記述することができる. $-1/e \notin \lambda(A)$ かつ $0 \notin \lambda(A)$ ならば, 分枝を自由に選ぶことができる. m を A のジョルダン標準形におけるジョルダンブロックの個数, $\lambda_1, \dots, \lambda_m$ を各ジョルダンブロックに所属する固有値とする. $W_{k_1,k_2,\dots,k_m}(A)$, $k_1, \dots, k_m \in \mathbb{Z}$ を各ジョルダンブロックに所属する固有値が $W_{k_1}(\lambda_1), \dots, W_{k_m}(\lambda_m)$ である行列ランベルト W 関数とする. ある $k \in \mathbb{Z}$ に対して $k_1 = \cdots = k_m = k$ である場合には, $W_{k,\dots,k}(A)$ と書く代わりに $W_k(A)$ と書いた方が記述が簡潔である. 関数値 $W_k(A)$ は大域的に一意である.

スカラーの場合と同様に, 行列ランベルト W 関数は遅延微分方程式への応用をもつ. 次の遅延微分方程式系を考える.

$$y'(t) = Ay(t-1), \quad t \geq 0, \quad A \in \mathbb{C}^{n\times n}, \quad \text{ただし} \quad y(t) = f(t), \quad t \in [-1, 0]$$

定数ベクトル $c \in \mathbb{C}^n$ に対して, $y(t) = e^{tW_k(A)}c$ はこの方程式の解となる. この方程式の一般解を $y(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{tW_k(A)}c_k$ のように記述できる [4, Section 2.14.9]. ここで, $c_k \in \mathbb{C}^n$, $k \in \mathbb{Z}$ は関数 f により決定される. $W_k(A)$ に対する効率的な数値計算アルゴリズムが [2] において提案されている.

本稿では, $W_k(A)$ に対する精度保証付き数値計算法について考える. すなわち, 途中に混入するすべての誤差を考慮した上で, $W_k(A)$ を包含する区間行列を与える数値計算法について考える. ここで, 区間行列とは各成分が区間である行列のことであり, 中心が $\mu \in \mathbb{C}$, 半径が $\varrho \geq 0$ の区間とは $\{z \in \mathbb{C} : |z - \mu| \leq \varrho\}$ のことである. 筆者が知る限り, $W_k(A)$ のために設計された精度保証付き数値計算法は過去に提案されていない. 一方, VERSOFT [9] 関数 `vermatfun` を実行すれば, この精度保証付き数値計算は可能である. この関数は行列ランベルト W 関数のみならず, 他の行列関数に対しても適用可能であり, INTLAB [11] 関数 `verifyeig` を実行し, A のすべての固有値と固有ベクトルを含む区間を求めることで所望の区間行列を算出する. `vermatfun` は算出された区間行列の中に含まれている行列ランベルト W 関数の値が $W_k(A)$ であることは保証しない. この関数は $\mathcal{O}(n^4)$ の演算回数を要する.

本稿の目的は $W_k(A)$ に対する反復型の精度保証付き数値計算法を提案することである. この手法は行列方程式 $We^W = A$ の解を含む区間行列を求め, その区間行列に含まれる解が一意かつ $W_k(A)$ であることを検証することにより, 所望の区間行列を与える. この手法は数値計算による A の固有分解に基づいており, 1 反復あたり $\mathcal{O}(n^3)$ の演算回数で実行可能である. この手法の実行中に $\lambda(A) \cap \mathbb{B}_k = \emptyset$ が証明されるため, これを仮定する必要はない.

本稿は既発表論文 [7] の要約である. 簡単のため, 本稿では定理 1, 2, 3, 補題 4, 5, 6, 7, 系 1 の証明を割愛する. これらの証明に興味のある読者は [7] を参照されたい.

本稿は次のように構成される. 2 節では表記を定義し, 利用する理論について述べる. 3 節では区間行列に含まれる $We^W = A$ の解が $W_k(A)$ であることを検証するための理論を与える. 4 節では $W_k(A)$ を含む区間行列を求めるための手法を提案する. 5 節では数値実験結果を報告する. 6 節では結論を述べ, [7] には書かれているが本稿には書かなかった内容について触れる.

2 準備

$M \in \mathbb{C}^{n\times n}$ に対して, M_{ij}, $M_{:j}$, $\lambda(M)$ をそれぞれ M の (i,j) 成分, 第 j 列, 固有値全体の集合とする. また, $|M| := (|M_{ij}|)$ とする. $M, N \in \mathbb{R}^{m\times n}$ に対して, $M \le N$ は $M_{ij} \le N_{ij}, \forall i, j$ を意味する. $v \in \mathbb{C}^n$ に対して, v_i は v の第 i 成分である. $\mathbb{R}_+ := [0, \infty)$, $\mathbb{R}^n_+ := \{v \in \mathbb{R}^n : v \ge 0\}$, $\mathbb{R}^{m\times n}_+ := \{M \in \mathbb{R}^{m\times n} : M \ge 0\}$ とする. $C \in \mathbb{C}^{n\times n}$, $R \in \mathbb{R}^{n\times n}_+$ に対して, $\langle C, R\rangle$ は中心, 半径がそれぞれ C, R である区間行列を意味する. すなわち, $\langle C, R\rangle = \{Z \in \mathbb{C}^{n\times n} : |Z - C| \le R\}$ である. $v \in \mathbb{C}^n$ と $\|w\|_\infty < 1$ を満たす $w \in \mathbb{C}^n$ に対して, $\|v\|_w := \max_i(|v_i|/(1 - |w_i|))$ とする. $\mathtt{eps}$, I_n, $\otimes$ をマシンイプシロン (特に IEEE 754 倍精度では $\mathtt{eps} = 2^{-52}$), $n \times n$ 単位行列, クロネッカー積 (例えば [3]) とする. すべての成分が 1 の $m \times n$ 行列を $\mathbb{1}_{m\times n}$ と書く. $\mathbb{1} := \mathbb{1}_{n\times 1}$ とする. $\circ$, $./$ はそれぞれ行列に対する成分毎の乗算, 除算を意味する. $W \in \mathbb{C}^{n\times n}$ に関するフレッシェ微分可能な行列関数 $F(W)$ に対して, H に作用する W 方向の F のフレッシェ微分作用素 (例えば [4]) を $F'_W(H)$ と書く. $M \in \mathbb{C}^{n\times n}$ に対して, $\mathrm{vec}(M)$ を次のように定義する.

$$\mathrm{vec}(M) := \begin{bmatrix} M_{:1} \\ \vdots \\ M_{:n} \end{bmatrix}$$

$\mathrm{fl}(\cdot)$ は括弧中の演算をすべて最近点丸めの浮動小数点演算によって実行したときの結果を意味する. $\overline{\mathrm{fl}}(\cdot)$, $\underline{\mathrm{fl}}(\cdot)$ をそれぞれ丸めモードが制御された浮動小数点演算により

得られた, 括弧内の値の厳密な上限, 下限とする. 関数 $\psi_k : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$, $k = 1, 2, \ldots$ を $\psi_k(z) := \sum_{j=0}^{\infty} z^j/(j+k)!$ により定める[*1]. このとき, 次式が成り立つ (例えば [4, Section 10.7.4]).

$$\int_0^1 e^{-zt} t^{k-1} dt = e^{-z}(k-1)!\psi_k(z)$$

次の補題は与えられた行列が正則であることを検証するのに有用である.

補題 1(例えば [3, Lemma 2.3.3]) $S \in \mathbb{C}^{n\times n}$ とする. $\|S\|_\infty < 1$ ならば, $I_n - S$ は正則である.

行列関数に関する次の性質を 4 節で用いる.

補題 2(例えば [4, Theorem 1.13]) $A, X \in \mathbb{C}^{n\times n}$ かつ $f : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ とする. $\lambda(A)$ 上で f が正則かつ X が正則ならば, $f(XAX^{-1}) = Xf(A)X^{-1}$ が成り立つ.

$AV \approx V\Lambda$ を数値計算による A の固有分解とする. ここで, Λ は対角行列である. また, $U \approx V^{-1}$ を数値計算による V^{-1} の計算結果とする. V が悪条件でなければ, $U(AV - V\Lambda) \approx 0$, $I_n - UV \approx 0$ を期待することができる. このとき, V, Λ, U を用いて $\lambda(A) \cap \mathbb{B}_k = \emptyset$ を検証することができる.

補題 3([5]) $A, \Lambda, V, U \in \mathbb{C}^{n\times n}$ とする. ここで, Λ は対角行列とし, $\lambda_i = \Lambda_{ii}$, $i = 1, \ldots, n$ とする. また, $T := U(AV - V\Lambda)$, $S := I_n - UV$, $t := |T|\mathbb{1}$, $s := |S|\mathbb{1}$ とする. $f \in \mathbb{C}^n$ を $f_i = \max(0, \mathrm{Re}(\lambda_i)) + \mathrm{Im}(\lambda_i)\sqrt{-1}$, $i = 1, \ldots, n$ により定義する. $\|s\|_\infty < 1$ を仮定し, $v := t + \|t\|_s s$ とする. $\min_j(|f_j| - v_j) > 0$ ならば, $\lambda(A) \cap (-\infty, 0] = \emptyset$ である.

系 1 λ_i, s, v を補題 3 と同様に定義する. $g \in \mathbb{C}^n$ を $g_i = \max(-1/e, \mathrm{Re}(\lambda_i)) + 1/e + \mathrm{Im}(\lambda_i)\sqrt{-1}$, $i = 1, \ldots, n$ により定義する. $\|s\|_\infty < 1$ かつ $\min_j(|g_j| - v_j) > 0$ ならば, $\lambda(A) \cap (-\infty, -1/e] = \emptyset$ が成り立つ.

[*1] 本稿では $\psi_1(z)$ しか使わないが, [7] では $\psi_2(z), \psi_3(z), \ldots$ も現れる. [7] と表記を統一するため, ψ_k, $k = 2, 3, \ldots$ も定義しておく.

3　$We^W = A$ の解が $W_k(A)$ であることを検証するための理論

行列方程式 $We^W = A$ の解を W_* とおく．$x \in \mathbb{C}^n$ と $r \in \mathbb{R}_+^n$ は $\lambda(W_*) \subseteq \bigcup_{i=1}^n \langle x_i, r_i \rangle$ を満たすとする．本節では, x と r を用いて $W_* = W_k(A)$ を検証するための理論を与える．

関数 $c : \mathbb{R} \setminus \{\pm\pi, \pm 2\pi, \dots\} \to \mathbb{R}$ を $c(x) = \begin{cases} -x \cot x & (x \neq 0) \\ -1 & (x = 0) \end{cases}$ により定義する．$c(x)$ は分枝の境界線を表すのに使用される ([1, Section 4] 参照)．$k = 1, 2, \dots,$ $m = 2, 3, \dots$ に対して, 次の定義を行う．

$$\begin{aligned}
\mathbb{W}_0 := &\{z \in \mathbb{C} : \mathrm{Re}(z) \geq c(\mathrm{Im}(z)) \text{ かつ } \mathrm{Im}(z) \in [0, \pi)\} \\
&\cup \{z \in \mathbb{C} : \mathrm{Re}(z) > c(\mathrm{Im}(z)) \text{ かつ } \mathrm{Im}(z) \in (-\pi, 0)\}, \\
\mathbb{W}_{-1} := &\{z \in \mathbb{C} : \mathrm{Re}(z) \leq c(\mathrm{Im}(z)) \text{ かつ } \mathrm{Im}(z) \in (-\pi, 0]\} \\
&\cup \{z \in \mathbb{C} : \mathrm{Im}(z) \in [-2\pi, -\pi]\} \\
&\cup \{z \in \mathbb{C} : \mathrm{Re}(z) > c(\mathrm{Im}(z)) \text{ かつ } \mathrm{Im}(z) \in (-3\pi, -2\pi)\}, \\
\mathbb{W}_k := &\{z \in \mathbb{C} : \mathrm{Re}(z) < c(\mathrm{Im}(z)) \text{ かつ } \mathrm{Im}(z) \in ((2k-2)\pi, (2k-1)\pi)\} \\
&\cup \{z \in \mathbb{C} : \mathrm{Im}(z) \in [(2k-1)\pi, 2k\pi]\} \\
&\cup \{z \in \mathbb{C} : \mathrm{Re}(z) \geq c(\mathrm{Im}(z)) \text{ かつ } \mathrm{Im}(z) \in (2k\pi, (2k+1)\pi)\}, \\
\mathbb{W}_{-m} := &\{z \in \mathbb{C} : \mathrm{Re}(z) \leq c(\mathrm{Im}(z)) \text{ かつ } \mathrm{Im}(z) \in (-(2m-1)\pi, -(2m-2)\pi)\} \\
&\cup \{z \in \mathbb{C} : \mathrm{Im}(z) \in [-2m\pi, -(2m-1)\pi]\} \\
&\cup \{z \in \mathbb{C} : \mathrm{Re}(z) > c(\mathrm{Im}(z)) \text{ かつ } \mathrm{Im}(z) \in (-(2m+1)\pi, -2m\pi)\}
\end{aligned}$$

[1, Section 4] より, $a \in \mathbb{C}$, $k \in \mathbb{Z}$ に対して, $w_* e^{w_*} = a$ かつ $w_* \in \mathbb{W}_k$ ならば, $w_* \in \mathbb{C}$ は $w_* = W_k(a)$ を満たすことが分かる．次の条件を定義する．

定義 1　$\mu \in \mathbb{C}$, $\rho \in \mathbb{R}_+$, $k \in \mathbb{Z}$ に対して, $\mathrm{Re}(\mu) \pm \rho + (\mathrm{Im}(\mu) \pm \rho)\sqrt{-1} \in \mathbb{W}_k$ かつ $\mathrm{Re}(\mu) \pm \rho + (\mathrm{Im}(\mu) \mp \rho)\sqrt{-1} \in \mathbb{W}_k$ ならば, 対 (μ, ρ) は条件 k を満たすと呼ぶ．$x \in \mathbb{C}^n$, $r \in \mathbb{R}_+^n$ に対して, すべての対 (x_i, r_i), $i = 1, \dots, n$ が条件 k を満たすとき, 対 (x, r) は条件 k を満たすと呼ぶ．

この定義の下, 次の結果を証明することができる．

補題 4　$\mu \in \mathbb{C}$, $\rho \in \mathbb{R}_+$, $k \in \mathbb{Z}$ とする．対 (μ, ρ) が条件 k を満たすならば, $\langle \mu, \rho \rangle \subsetneq \mathbb{W}_k$ である．

定理 1　$W_* \in \mathbb{C}^{n\times n}$, $x \in \mathbb{C}^n$, $r \in \mathbb{R}^n_+$ が $W_* e^{W_*} = A$ かつ $\lambda(W_*) \subseteq \bigcup_{i=1}^n \langle x_i, r_i\rangle$ を満たすとする. $k \in \mathbb{Z}$ に対して, 対 (x, r) が条件 k を満たすならば, $W_* = W_k(A)$ である.

4　提案手法

$AV \approx V\Lambda$ を数値計算による A の固有分解とする. ここで, Λ は対角行列であり, $\lambda_i := \Lambda_{ii}$, $i = 1, \ldots, n$ とおく. また, $U \approx V^{-1}$ を数値計算による V^{-1} の計算結果とする. さらに, $S := I_n - UV$, $T := U(V\Lambda - AV)$ とする. V が悪条件ではなければ, $S \approx 0$, $T \approx 0$ が期待できる. さらに, $\|S\|_\infty < 1$ ならば, 補題 1 より $I_n - S$ は正則である. その結果, V, U もまた正則である.

以後, $\|S\|_\infty < 1$ が計算機内で検証できたとして議論を進める (検証ができなかった場合には提案手法は失敗する). このとき, $I_n - S$, V, U は正則である. $F(W) := We^W - A$, $X := V^{-1}WV$ とする.

まず, $F(W) = 0$ の解 W_* を含む区間行列を求めることを考える. $F(W) = 0 \Leftrightarrow V^{-1}F(W)V = 0$ が成り立つ. 補題 2 より, $V^{-1}F(W)V = Xe^X - V^{-1}AV = Xe^X - \Lambda + (I_n - S)^{-1}T$ である. よって, $F(W) = 0$ は次式と同値である.

$$G(X) := Xe^X - \Lambda + (I_n - S)^{-1}T = 0 \tag{1}$$

$k \in \mathbb{Z}$ に対して, $\widetilde{X}$ を $W_k(\Lambda) = \mathrm{diag}(W_k(\lambda_1), \ldots, W_k(\lambda_n))$ に対する数値計算結果 (近似) とする. $\widetilde{X}e^{\widetilde{X}} \approx \Lambda$, $(I_n - S)^{-1}T \approx 0$ が期待できるから, $\widetilde{X}$ は (1) の近似解とみなすことができる. さらに, $W_k(A)$ に対する数値計算結果は一般に密行列なのに対して, $\widetilde{X}$ は対角行列である. この $\widetilde{X}$ のもつ非ゼロ構造を利用するために, $F(W) = 0$ の代わりに (1) を扱う. すなわち, (1) の解 X_* を含む区間行列 $\boldsymbol{X}$ を求め, $\{VXV^{-1} : X \in \boldsymbol{X}\}$ の上位集合を求めることにより W_* を含む区間行列を求める. $W_* = VX_*V^{-1}$ であるから, この上位集合は W_* を含んでいる.

次に, $\boldsymbol{X}$ を求める方法について議論する. 行列指数関数に対する摂動理論を利用することにより, 以下を示すことができる (証明の詳細は [7] 参照).

$$G'_X(H) = He^X + Xe^X \int_0^1 e^{-Xt} H e^{Xt} dt$$

$G'_{\widetilde{X}}(H)$ が可逆ならば, ニュートン作用素 $N(X) := X - (G'_{\widetilde{X}})^{-1}(G(X))$ は well-defined となり, (1) の解 X_* は $N(X)$ の不動点である. そこで, $\boldsymbol{X}$ を求めるために, $G'_{\widetilde{X}}(H)$ の可逆性と $\{N(X) : X \in \langle \widetilde{X}, R\rangle\} \subseteq \langle \widetilde{X}, R\rangle$ を検証する. ただし, $R \in \mathbb{R}^{n\times n}_+$ は与えられ

ているものとする．これらが検証できれば，ブラウワーの不動点定理より，$X_* \in \langle \widetilde{X}, R\rangle$ が成り立つ．よって，$X_* = N(X_*) \in \{N(X) : X \in \langle \widetilde{X}, R\rangle\}$ が成り立つ．ゆえに，$\{N(X) : X \in \langle \widetilde{X}, R\rangle\}$ を含んでいる区間行列を $\boldsymbol{X}$ とみなすことができる．

次のようにして，$G'_{\widetilde{X}}(H)$ の可逆性を検証することができる．行列 $\mathsf{P} \in \mathbb{C}^{n^2\times n^2}$ を次式により定義する．

$$\mathsf{P} := e^{\widetilde{X}} \otimes I_n + (I_n \otimes \widetilde{X}e^{\widetilde{X}})\int_0^1 e^{t\widetilde{X}} \otimes e^{-t\widetilde{X}}dt$$

クロネッカー積の性質を利用することにより，$\mathrm{vec}(G'_{\widetilde{X}}(H)) = \mathsf{P}\mathrm{vec}(H)$ のように，$G'_{\widetilde{X}}(H)$ を行列ベクトル積の形に書くことができる (詳細は [7] 参照)．よって，P が正則ならば，$G'_{\widetilde{X}}(H)$ は可逆である．P が正則性を検証し，その結果として $G'_{\widetilde{X}}(H)$ の可逆性を検証するための理論を以下に与える．

補題 5 $V, U \in \mathbb{C}^{n\times n}$ とする．S, $G'_X(H)$ を上記と同様に定義する．$\widetilde{X} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ を対角行列とし，$x_i := \widetilde{X}_{ii}$ とおく．この $\widetilde{X}$ に対して，P を上記と同様に定義する．$\Psi \in \mathbb{C}^{n\times n}$ を $\Psi_{ij} := e^{x_j} + x_i e^{x_j}\psi_1(x_i - x_j)$, $i, j = 1, \ldots, n$ により定義する．$s := |S|\mathbb{1}$ とする．$\|s\|_\infty < 1$ かつ $|\Psi| > 0$ ならば，$I_n - S$, V, U, P は正則かつ $G'_{\widetilde{X}}(H)$ は可逆である．

$\{N(X) : X \in \langle \widetilde{X}, R\rangle\} \subseteq \langle \widetilde{X}, R\rangle$ を検証するために，$\{N(X) : X \in \langle \widetilde{X}, R\rangle\}$ の上位集合を求めることにする．この上位集合は次のようにして得られる．$N(X) = X - (G'_{\widetilde{X}})^{-1}(G(X))$ は $G'_{\widetilde{X}}(N(X)) = G'_{\widetilde{X}}(X) - G(X)$ と同値である．よって，$\{N(X) : X \in \langle \widetilde{X}, R\rangle\}$ は以下に示すパラメータ付き行列方程式の解全体の集合である．

$$N_X e^{\widetilde{X}} + \widetilde{X}e^{\widetilde{X}}\int_0^1 e^{-\widetilde{X}t}N_X e^{\widetilde{X}t}dt = G'_{\widetilde{X}}(X) - G(X) \tag{2}$$

ここで，$N_X \in \mathbb{C}^{n\times n}$ が解であり，$X \in \langle \widetilde{X}, R\rangle$ がパラメータである．ゆえに，この解集合を包含する区間行列を求めることにより，上記の上位集合を得ることができる．$\mathcal{O}(n^3)$ の演算回数でこの区間行列を求めることができる．

補題 6 $\Lambda \in \mathbb{C}^{n\times n}$, $R \in \mathbb{R}_+^{n\times n}$ とする． T, $N(X)$ を上記と同様に定義する． $\widetilde{X}$, x_i, s, Ψ を補題 5 と同様に定義する． 対角行列 $D_-, D_+ \in \mathbb{R}_+^{n\times n}$ を $(D_-)_{ii} = \max(1, e^{-\mathrm{Re}(x_i)})$, $(D_+)_{ii} = \max(1, e^{\mathrm{Re}(x_i)})$, $i = 1, \ldots, n$ により定義する． $E \in \mathbb{R}_+^{n\times n}$ を $E_{ij} = \max(1, e^{\mathrm{Re}(x_j - x_i)})$, $i, j = 1, \ldots, n$ により定義する．$\alpha := \min(\|R\|_\infty e^{\||\widetilde{X}|+R\|_\infty}, \|R\|_1 e^{\||\widetilde{X}|+R\|_1})$, $L := Re^{\mathrm{Re}(\widetilde{X})}D_-R(D_+ + (\alpha/2)\mathbb{1}_{n\times n})$, $M := (1/2)|\widetilde{X}e^{\widetilde{X}}|(E \circ R)D_-R(D_+ + (\alpha/3)\mathbb{1}_{n\times n})$ とする．$\|s\|_\infty < 1$ かつ $|\Psi| > 0$ を仮

定し, $w := [\|T_{:1}\|_s, \dots, \|T_{:n}\|_s]^T$, $B := |\widetilde{X}e^{\widetilde{X}} - \Lambda| + |T| + sw^T + L + M$, $\Delta := B./|\Psi|$ と定義する．このとき, $\{N(X) : X \in \langle \widetilde{X}, R\rangle\} \subseteq \langle \widetilde{X}, \Delta\rangle$ が成り立つ.

補題 5, 6 より, W_* を含む区間行列を求めるための理論が得られる.

補題 7　補題 5 における仮定の下, $\widetilde{X}$, V, U, s を補題 5 と同様に定義し, R, Δ を補題 6 と同様に定義する．$\Delta_S, Y, Q \in \mathbb{R}_+^{n\times n}$, $\widetilde{W} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ とする．W_* を上記と同様に定義し, $u := [\|U_{:1}\|_s, \dots, \|U_{:n}\|_s]^T$, $U_S := |U| + su^T$ とする．$V\widetilde{X}V^{-1} \in \langle \widetilde{W}, Y\rangle$ かつ $\Delta \le \Delta_S \le R$ かつ $Q \ge Y + |V|\Delta_S U_S$ ならば, $\langle \widetilde{W}, Q\rangle \ni W_*$ が成り立つ.

注意 1　実際に提案手法を実行する際には, $\Delta_S = \overline{\mathrm{fl}}(\Delta)$, $Q = \overline{\mathrm{fl}}(Y + |V|\Delta_S U_S)$ により Δ_S, Q をそれぞれ求める．また, $\widetilde{W}$, Y は $V\widetilde{X}V^{-1}$ を含む区間行列を計算すれば得られる．このような区間行列を得るためのアルゴリズムはすでに知られている．筆者の実装では, INTLAB 関数 `verifylss` が使用されている.

補題 3 または系 1 により, $\lambda(A) \cap \mathbb{B}_k = \emptyset$ を検証することができる．以上の理論と定理 1 により, 次の定理 2, 3 が得られる.

定理 2　x_i, V, U, s を補題 5 と同様に定義し, Y, $\widetilde{W}$, W_*, Q を補題 7 と同様に定義する．$k \in \mathbb{Z}$, $x := [x_1, \dots, x_n]^T$, $h := |U|(Y + Q)|V|\mathbb{1}$ とする．補題 5, 7 におけるすべての仮定の下, $r := h + \|h\|_s s$ とする．$\lambda(A) \cap \mathbb{B}_k = \emptyset$ かつ (x, r) が条件 k を満たしているとき, $W_* = W_k(A)$ であり, W_* は $\langle \widetilde{W}, Q\rangle$ に含まれる唯一の $F(W) = 0$ の解である.

定理 3　Δ_S, W_* を補題 7 と同様に定義し, x を定理 2 と同様に定義する．$q := \Delta_S\mathbb{1}$ とする．補題 5, 7 におけるすべての仮定に加えて, $\lambda(A) \cap \mathbb{B}_k = \emptyset$ かつ (x, q) が条件 k を満たしていることを仮定する．このとき, $W_* = W_k(A)$ である.

注意 2　[5, Remark 4] と同様に, $q \le r$ が成り立つ．よって, 定理 3 の条件は定理 2 の条件よりも成立しやすい．一方, [5, Remark 4] と同様に, 定理 2 は得られた区間行列に含まれる解の一意性を保証するのに対して, 定理 3 はこれを保証しない.

以上の議論に基づき, 次のアルゴリズム 1 を提案する.

アルゴリズム 1　$\beta \in \mathbb{R}$ とし, $j_{\max} \in \mathbb{Z}$ は 1 よりも大きいとする．$k \in \mathbb{Z}$ に対して, 本アルゴリズムは $\langle \widetilde{W}, Q\rangle \ni W_k(A)$ を満たす $\widetilde{W} \in \mathbb{C}^{n\times n}$, $Q \in \mathbb{R}_+^{n\times n}$ を算出する．検証が成功した場合にはこの区間行列に含まれる解の一意性も保証される.

Step 1. 数値計算による A の固有分解を用いて Λ, V を求める．$U = \mathrm{fl}(V^{-1})$, $\widetilde{X} = \mathrm{fl}(W_k(\Lambda))$ により, U, $\widetilde{X}$ をそれぞれ求める．

Step 2. $\overline{\mathrm{fl}}(s)$ を求める．$\|s\|_\infty < 1$ が検証できなかった場合には, 失敗して終了．

Step 3. $\underline{\mathrm{fl}}(|\Psi|)$ を求める．$|\Psi| > 0$ が検証できなかった場合には, 失敗して終了．

Step 4. 補題 3 または系 1 に基づいて $\lambda(A) \cap \mathbb{B}_k = \emptyset$ を検証する．これが検証できなかった場合には, 失敗して終了．

Step 5. $R_0 := \overline{\mathrm{fl}}(|\widetilde{X}e^{\widetilde{X}} - \Lambda| + |T| + sw^T)$ を求める．$j = 1$, $R = \overline{\mathrm{fl}}(\beta R_0)$ により, j と R を初期化する．

Step 6. $j = j_{\max}$ ならば, 失敗して終了．さもなくば, $\Delta_S = \overline{\mathrm{fl}}(\Delta)$ を求める．

Step 7. $\Delta_S \le R$ ならば, Step 8 へ進む．さもなくば, $j = j + 1$, $R = \overline{\mathrm{fl}}(\mathsf{eps}|\widetilde{X}| + (1 + \mathsf{eps})\Delta_S)$ により j と R を更新し, Step 6 へ戻る．

Step 8. $V\widetilde{X}V^{-1}$ を含む区間行列 $\langle \widetilde{W}, Y\rangle$ を求める．$Q = \overline{\mathrm{fl}}(Y + |V|\Delta_S U_S)$ を求める．このとき, $W_* \in \langle \widetilde{W}, Q\rangle$ が成り立つ．

Step 9. $\overline{\mathrm{fl}}(r)$ を求める．(x, r) が条件 k を満たすことを検証できなかった場合には, Step 10 へ進む．さもなくば, $W_* = W_k(A)$ かつ W_* は $\langle \widetilde{W}, Q\rangle$ に含まれる唯一の解である．終了．

Step 10. $\overline{\mathrm{fl}}(q)$ を求める．(x, q) が条件 k を満たすことを検証できなかった場合には, 失敗して終了．さもなくば, $W_* = W_k(A)$ である．終了．

$\underline{\mathrm{fl}}(|\Psi|)$ を求めるためには, $\psi_1(x_i - x_j)$ を含む区間を算出する必要がある．このような区間の算出は [6, Section 3] の議論により可能である．R の更新はいわゆるイプシロンインフレーション [10] に基づいている．イプシロンインフレーションでは, 新たな候補者集合は $\langle 1, \mathsf{eps}\rangle$ と $\{N(X) : X \in \langle \widetilde{X}, R\rangle\}$ を含む区間との積である．大雑把に言えば, R の更新はこの積に対応している．実際, $\{N(X) : X \in \langle \widetilde{X}, R\rangle\} \subseteq \langle \widetilde{X}, \Delta_S\rangle$, $\langle 1, \mathsf{eps}\rangle\langle \widetilde{X}, \Delta_S\rangle \subseteq \langle \widetilde{X}, \mathsf{eps}|\widetilde{X}| + (1 + \mathsf{eps})\Delta_S\rangle$ が成り立つ．

Δ_S の計算は $n \times n$ 行列の行列乗算を要する．この計算における演算階数は $\mathcal{O}(n^3)$ である．反復 (Steps 6–7) における他の部分の計算コストはわずかなものである．ゆえに, アルゴリズム 1 は 1 反復あたり $\mathcal{O}(n^3)$ の演算回数のみで実行可能である．なお, $\overline{\mathrm{fl}}(e^{\mathrm{Re}(\widetilde{X})})$, $\overline{\mathrm{fl}}(|\widetilde{X}e^{\widetilde{X}}|)$, $\overline{\mathrm{fl}}(D_-)$, $\overline{\mathrm{fl}}(D_+)$, $\overline{\mathrm{fl}}(E)$ については, 反復を始める前に算出可能であることに注意する．

注意 3 1 節の第 3 段落でも述べたように, 本稿では $\lambda(A) \cap \mathbb{B}_k = \emptyset$ の場合に焦点を当てている．ゆえに, $\lambda(A) \cap \mathbb{B}_k = \emptyset$ が検証できなかった場合には, アルゴリズム 1 は失敗する．$\lambda(A) \cap \mathbb{B}_k = \emptyset$ の場合に焦点を当てている理由は $\lambda(A) \cap \mathbb{B}_k \neq \emptyset$ の場合には,

$W_* = W_k(A)$ の検証が困難となるためである．実際, $\lambda(A) \cap \mathbb{B}_k \neq \emptyset$ ならば, A の固有値 λ_* で $\lambda_* \in \mathbb{B}_k$ を満たすものが存在する．このとき, $W_k(A)$ の固有値 $W_k(\lambda_*)$ は $\mathbb{W}_k$ の境界上にある ([1, Section 4] 参照)．よって, $W_k(\lambda_*)$ を含む区間を求めると, その区間は $\mathbb{W}_k$ 上の点と $\mathbb{C} \setminus \mathbb{W}_k$ 上の点の両方を含む．その結果, $W_k(\lambda_*) \in \mathbb{W}_k$ の検証は困難となる．アルゴリズム 1 はこのような場合を早期の段階で検出している．

5 数値実験結果

数値実験を行った計算機の仕様は Intel Core 1.51 GHz CPU, 16.0 GB RAM である．使用した数値計算ソフトは MATLAB R2012a (Intel Math Kernel Library, IEEE 754 倍精度) である．

比較するアルゴリズムを次のように記載する．

`Ms`: アルゴリズム 1. $\lambda(A) \cap \mathbb{B}_k = \emptyset$, $W_* = W_k(A)$, 得られた区間行列に含まれる解の一意性がすべて検証される．

`V`: VERSOFT 関数 `vermatfun`. $\lambda(A) \cap \mathbb{B}_k = \emptyset$, $W_* = W_k(A)$, 得られた区間行列に含まれる解の一意性がすべて検証されない．

まず, `Ms` の実装について説明する．固有分解を実行するのに MATLAB 関数 `eig` を用いた．β, $j_{\max}$ をそれぞれ $\beta = 2$, $j_{\max} = 30$ のように設定し, `verifylss` を用いて $\widetilde{W}$, Y を算出した．$\widetilde{X} \approx W_k(\Lambda) = \mathrm{diag}(W_k(\lambda_1), \ldots, W_k(\lambda_n))$ を, MATLAB Symbolic Math Toolbox の関数 `lambertw` を用いて求めた．アルゴリズム 1 の MATLAB コード `Ms.m` は `https://bitbucket.org/miyajimash/verifiedlambertw/downloads/` で公開されている．ただし, 実行には INTLAB が必要となる．

次に, `V` の実装について説明する．$W_0(A)$ を含む区間行列を求める場合, `vermatfun` を `vermatfun('verLambertW(x,0)',A)` のように呼び出した．ここで, `verLambertW` は次の関数である．

```
function res = verLambertW(x,k)
xs = double(lambertw(k,sym(mid(x))));  res = verifynlss(F(x),xs);


function f = F(x)
f = @(w) (w*exp(w)-x);
```

INTLAB 関数 `verifynlss` は非線形方程式の解を含む区間を算出するものであり, 得られた区間に含まれる解の一意性を検証する．しかし, `vermatfun` の中で行われる区間行列同士の乗算が引き起こすラッピング効果 (例えば [8]) により, `V` を用いて得られた区間行列に含まれる $F(W) = 0$ 解 W_* の一意性は保証されない.

$W \in \mathbb{C}^{n\times n}$, $Q \in \mathbb{R}_+^{n\times n}$ が $\langle \widetilde{W}, Q\rangle \ni W_k(A)$ を満たすとする．得られた区間行列の品質を評価するために, 相対半径を $\|Q\|_\infty/\|\widetilde{W}\|_\infty$ により定義する．いくつかのテスト行列に対して, `V` は失敗した．失敗の原因は A のすべての固有値と固有ベクトルを含む区間の算出に失敗したためである．表 1 の $n = 11$, 13 の場合を除いて, `Ms` における解の一意性の検証は成功した.

数値例 1

MATLAB 関数 `gallery` を用いて `frank`, `gcdmat`, `minij`, `poisson` 行列を生成した．これらの行列のサイズ n については, 自由に設定することができる．様々な n に対して, 各アルゴリズムを用いて $W_0(A)$ と $W_{-1}(A)$ を含む区間行列を計算した際の相対半径と実行時間 (秒) を表 1–4 に示す．`Ms` が `V` よりも高速であったことが確認できる．また, 多くの場合, `Ms` の与えた相対半径は `V` の与えた相対半径よりも小さかったことも確認できる.

表 1　`frank` 行列に対する相対半径 (左側) と実行時間 (秒 · 右側). $W_0(A)$, $W_{-1}(A)$ を含む区間行列を計算した場合のこれらの値をそれぞれ上部, 下部に表示している.

n	`Ms`	`V`	`Ms`	`V`
5	1.7e−13	2.9e−13	6.2e−2	1.4e−1
7	3.1e−10	1.5e−10	5.9e−2	1.7e−1
9	1.3e−7	3.3e−7	7.6e−2	2.5e−1
11	6.0e−3	8.5e−4	1.3e−1	3.0e−1
13	3.5e+0	3.6e+0	9.9e−2	3.7e−1
5	1.8e−13	6.7e−13	8.1e−2	2.0e−1
7	1.3e−10	1.2e−10	7.2e−2	2.6e−1
9	7.0e−9	4.0e−8	6.3e−2	3.1e−1
11	5.1e−5	1.4e−5	7.8e−2	4.3e−1
13	4.1e−3	9.0e−3	1.3e−1	5.8e−1

表 2　`gcdmat` 行列に対する相対半径 (左側) と実行時間 (秒 · 右側). $W_0(A)$, $W_{-1}(A)$ を含む区間行列を計算した場合のこれらの値をそれぞれ上部, 下部に表示している.

n	`Ms`	`V`	`Ms`	`V`
50	4.0e−13	2.5e−11	2.9e−1	2.5e+0
100	1.9e−12	2.6e−10	5.9e−1	8.1e+0
150	5.0e−12	7.8e−10	8.8e−1	1.9e+1
200	1.1e−11	2.6e−9	2.1e+0	3.1e+1
250	1.7e−11	5.9e−9	1.6e+0	4.7e+1
50	4.0e−13	3.2e−11	3.6e−1	3.1e+0
100	1.7e−12	3.0e−10	6.9e−1	9.5e+0
150	4.5e−12	8.9e−10	8.9e−1	2.2e+1
200	9.5e−12	2.9e−9	1.4e+0	3.4e+1
250	1.5e−11	6.4e−9	1.8e+0	5.0e+1

数値例 2

A が対角化不可能な行列に近づいていく場合を考える. 各アルゴリズムを次の A に対して適用した.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1+\varepsilon \end{bmatrix}, \quad \text{ただし} \quad \varepsilon \in \mathbb{R}_+$$

この例は [2, Experiment 1] で扱われている. この例では, ε が 0 に近づくにつれて, A の固有ベクトルから成る行列が悪条件になっていく. ε を 2^0 から 2^{-52} まで変化させた場合の表 1–4 と同様の値を表 5 に示す. `Ms`, `V` の与えた相対半径は ε の減少につれて増加していることが分かる.

6　結文

本稿ではアルゴリズム 1 を提案し, 数値実験によりその有効性や限界を示した. 数値例 2 で見たように, 固有ベクトルから成る行列が悪条件の場合, アルゴリズム 1 は小さな相対半径を与えない. この問題に対する対策として, [7] では数値ジョルダン分解を利用した手法がアルゴリズム 1 以外に提案されている. 数値例 2 に対してこの手法を適用すると, ε が減少しても相対半径が増加することはない ([7] 参照). ただし, この方法は $\mathcal{O}(n^4)$

表 3　`minij` 行列に対する相対半径 (左側) と実行時間 (秒 · 右側). $W_0(A)$, $W_{-1}(A)$ を含む区間行列を計算した場合のこれらの値をそれぞれ上部, 下部に表示している.

n	`Ms`	`V`	`Ms`	`V`
50	1.0e−11	3.7e−9	3.3e−1	2.6e+0
100	1.3e−10	1.2e−7	6.5e−1	8.2e+0
150	6.3e−10	9.6e−7	8.6e−1	1.9e+1
200	1.8e−9	4.0e−6	1.3e+0	3.1e+1
250	4.3e−9	1.2e−5	1.7e+0	4.7e+1
50	2.0e−11	9.2e−9	3.0e−1	3.0e+0
100	2.9e−10	3.3e−7	5.9e−1	9.2e+0
150	1.4e−9	2.7e−6	9.5e−1	2.1e+1
200	4.2e−9	1.1e−5	1.4e+0	3.4e+1
250	1.0e−8	3.5e−5	1.8e+0	5.1e+1

表 4　`poisson` 行列に対する相対半径 (左側) と実行時間 (秒 · 右側). $W_0(A)$, $W_{-1}(A)$ を含む区間行列を計算した場合のこれらの値をそれぞれ上部, 下部に表示している.

n	`Ms`	`V`	`Ms`	`V`
9	9.1e−15	失敗	7.4e−2	失敗
36	9.1e−14	失敗	2.2e−1	失敗
81	4.7e−13	失敗	4.8e−1	失敗
144	1.2e−12	失敗	8.0e−1	失敗
9	8.1e−15	失敗	1.4e−1	失敗
36	5.6e−14	失敗	3.8e−1	失敗
81	3.1e−13	失敗	1.0e+0	失敗
144	6.5e−13	失敗	1.8e+0	失敗

以上の演算回数を要する.

表 5　数値例 2 における相対半径 (左側) と実行時間 (秒 · 右側). $W_0(A)$, $W_{-1}(A)$ を含む区間行列を計算した場合のこれらの値をそれぞれ上部, 下部に表示している.

ε	Ms	V	Ms	V
2^0	1.1e−15	1.0e−14	4.1e−2	5.4e−2
2^{-26}	2.0e−8	4.1e−7	3.6e−2	6.6e−2
2^{-39}	1.7e−4	3.6e−3	3.8e−2	6.1e−2
2^{-48}	7.6e−1	1.8e+0	3.9e−2	5.9e−2
2^{-52}	7.2e+0	失敗	3.9e−2	失敗
2^0	6.8e−16	2.0e−14	4.0e−2	7.3e−2
2^{-26}	2.2e−8	8.6e−7	2.9e−2	6.7e−2
2^{-39}	1.9e−4	7.0e−3	4.5e−2	7.9e−2
2^{-48}	3.4e−1	3.4e+0	3.1e−2	6.9e−2
2^{-52}	3.3e+0	失敗	3.9e−2	失敗

謝辞

2024 年度 京都大学数理解析研究所 共同研究 (公開型)「時間遅れ系と数理科学：理論と応用の新たな展開に向けて」における講演の機会を与えてくださった組織委員の皆様に謝意を表する. 本研究は日本学術振興会科学研究費補助金 (課題番号: 16K05270) の助成を受けている.

参考文献

[1] R.M. Corless, G.H. Gonnet, D.E.G. Hare, D.J. Jeffrey, D.E. Knuth, On the Lambert W function, Adv. Comput. Math. 5 (1996) 329–359.

[2] M. Fasi, N.J. Higham, B. Iannazzo, An algorithm for the matrix Lambert W function, SIAM J. Matrix Anal. Appl. 36 (2015) 669–685.

[3] G.H. Golub, C.F. Van Loan, Matrix Computations, fourth ed., Johns Hopkins University Press, Baltimore, 2013.

[4] N.J. Higham, Functions of Matrices: Theory and Computation, SIAM Publications, Philadelphia, 2008.

[5] S. Miyajima, Fast verified computation for the matrix principal pth root, J. Comput. Appl. Math. 330 (2018) 276–288.

[6] S. Miyajima, Verified computation of the matrix exponential, Adv. Comput. Math. 45 (2019) 137–152.

[7] S. Miyajima, Verified computation for the matrix Lambert W function, Appl. Math. Comput. 362 (2019) 124555, 1–15.

[8] A. Rauh, M. Kletting, H. Aschemann, E.P. Hofer, Reduction of overestimation in interval arithmetic simulation of biological wastewater treatment processes, J. Comput. Appl. Math. 199 (2007) 207–212.

[9] J. Rohn, VERSOFT: Verification Software in MATLAB/INTLAB, `http://uivtx.cs.cas.cz/~rohn/matlab`

[10] S.M. Rump, Verification methods for dense and sparse systems of equations, in: J. Herzberger (Ed.), Topics in Validated Computations - Studies in Computational Mathematics, Elsevier, Amsterdam, 1994, pp. 63–136.

[11] S.M. Rump, INTLAB - INTerval LABoratory, in: T. Csendes (Ed.), Developments in Reliable Computing, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1999, pp. 77–104.