

線形方程式を解くための連分数法

7 L-3

笹川辰弥

日本大学工学部情報工学科

1. はじめに

多項式の計算をする前に、その一部分の項を分母を持って行けるかどうかを考えるのは賢明なやり方であるといえよう。一番簡単な例としては、和 $1 + x + x^2 + \dots$ よりも $(1-x)^{-1}$ の方がずっと簡単であるし、何よりもこの和は $|x| \leq 1$ でのみ収束するが $(1-x)^{-1}$ は $x = 1$ 以外ではどこでも値が求まる。この考えを更に一般の多項式に用いたものがパデ近似である。

私はかつて [1]、この考えをリップマン・シュヴィンガー (LS) の積分方程式に用いて散乱振幅をヨスト関数とその虚数部の比に書きあらわした。ヨスト関数はヨスト解の原点での値であるが [2]、リップマン・シュヴィンガーの式の積分核 K_F は Fredholm 型なのでその逐次代入は必ずしも収束しない。これに対し、ヨスト解の積分核 K_V は Volterra 型なので逐次代入は収束する。この方法では、もとの積分核を分離可能な項の和 $K_F = K_V + ab^T$ に書きあらわし、LS 式を K_V であらわしたのである。この考えを拡張して連分数法 [3] (MCF) を考え、三重陽子やヘリウム 3 の計算を行った [4]。

本論文では行列（または積分核）が対称な場合に限り、先ず第2節で MCF について述べ、第3節では悪条件 (ill-conditioned) 行列として知られるヒルバート行列 [5] を例にとって、ガウス法なら 20×20 行列で既に正しい答が求められないが、MCF では 200×200 行列の場合でも正しい答が求まり、行列が大きい場合でも頑健であることを示す。

2. 連分数法

 N 次元ベクトル空間での線形方程式

$$\mathbf{x}_0 = \mathbf{b}_0 + \mathbf{A}_0 \mathbf{x}_0 \quad (1)$$

を考える。ここで \mathbf{A}_0 は対称行列（または対称核）である。ベクトル $\mathbf{b}_i (i = 1, 2, \dots, N)$ が次々に

$$\mathbf{b}_i = \mathbf{A}_{i-1} \mathbf{b}_{i-1} \quad (2)$$

で与えられるとする。ここで \mathbf{A}_i は

$$\mathbf{A}_i = \mathbf{A}_{i-1} - \frac{\mathbf{b}_i \mathbf{b}_i^T}{(\mathbf{b}_{i-1}^T, \mathbf{b}_i)} \quad (3)$$

で定義されるとする。このとき直交関係

$$\mathbf{A}_i \mathbf{b}_j = \mathbf{b}_j^T \mathbf{A}_i = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, N; j < i) \quad (4)$$

が得られる。 \mathbf{x}_i を方程式

$$\mathbf{x}_i = \mathbf{b}_i + \mathbf{A}_i \mathbf{x}_i \quad (5)$$

の解であると定義して、逐次代入方程式の組

$$(\mathbf{b}_{i-1}^T, \mathbf{x}_{i-1}) = (\mathbf{b}_{i-1}^T, \mathbf{b}_{i-1}) + \frac{(\mathbf{b}_{i-1}^T, \mathbf{b}_i)^2}{(\mathbf{b}_{i-1}^T, \mathbf{b}_i) - (\mathbf{b}_i^T, \mathbf{x}_i)} \quad (6)$$

$$\mathbf{x}_{i-1} = \mathbf{b}_{i-1} + \mathbf{x}_i \frac{(\mathbf{b}_{i-1}^T, \mathbf{b}_i)}{(\mathbf{b}_{i-1}^T, \mathbf{b}_i) - (\mathbf{b}_i^T, \mathbf{x}_i)} \quad (7)$$

が求まる。連分数の式(6)により、もしすべての (b_i^T, x_i) が得られれば x_0 を式(7)から求めることが出来る。

連分数法が $i = N$ で終わることを導く

$$x_N = b_N \quad (8)$$

従って

$$(b_N^T, x_N) = (b_N^T, b_N) \quad (9)$$

となる。このことから式(6)の組は有限連分数であることがわかる。従って連分数法は離散化された N 次元空間での数学的に正確な解を与える。

3. 例

例としてヒルバート行列

$$M_{ij} = (1 - A_0)_{ij} = \frac{1}{i + j - 1} \quad (10)$$

をとろう。この行列は ill-conditioned であるとして悪名が高い。この論文では、計算は ACOS2000 で遂行された。この例では、 b_0 は x_0 のすべての成分が 1 となるように与えられた。われわれの仕事はこのようにして決められた $\{b_0\}$ に対して第4節で述べた方法で x_0 を求めることである。ここではガウスの掃出し法(GS)と上昇公式(MCF-AS)で計算した結果を示す。

例えば $N = 20$ に対して、GS を用いると x_0 の各成分として $(x_0)_j (j = 1, 2, \dots, 20) = (0.999, 1.000, 0.999, 1.013, 0.884, 1.554, -0.504, 3.130, -0.502, 4.600, -12.815, 19.176, 11.287, -54.029, 56.922, -4.416, -32.390, 29.721, 8.856, 2.223)$ がえられるが、MCF-AS では $(0.999, 1.000, 0.996, 1.001, 1.002, 1.001, 0.999, 0.997, 0.997, 0.998, 0.999, 1.000, 1.001, 1.002, 1.002, 1.001, 1.000, 0.998, 0.996)$ を得る。このようにして MCF は役に立つことが一見してわかる。 $N = 200$ の場合、平均誤差は $\frac{1}{N}(\sum_j^N (1 - (x_0)_j)^2)^{1/2} = 1.368 \times 10^{-3}$ となる。従って MCF は $N = 200$ でも頑健さを損わない。

参考文献

- [1] Sasakawa, T. Prog. Theor. Phys. Supple. **27**, 1(1963).
- [2] 笹川辰弥, 散乱理論、裳華房 (1991)。
- [3] Horáček, J. and Sasakawa, T. Phys. Rev. **A28**, 2151(1983); **A30**, 2274(1984); **C32**, 70(1985).
- [4] Sasakawa, T. and Ishikawa, S. Few-Body Systems **1**, 3, 143(1986). 仙台3体グループの総合報告は Few-Body Systems 投稿中。
- [5] Nash, N.C. *Compact Numerical Methods for Computers: Linear Algebra and Function Minimization*. Hilger, Bristol, 1990. Appendix.