2006－HPC－106 (3)
2006／6／12

代数方程式の多項式基底展開と行列固有値解法

村上 弘

首都大学東京 数理情報科学専攻 数理科学コース

代数方程式に対する随伴行列法 (コンパニオン法) は、方程式の根を多項式基底に乗じる作用を表現する行列を構成し、行列固有値解法で根を得る方法である。本報告ではこの随伴行列法のさらなる応用を考察する。以下の手順で、振舞の良い関数 F のある区間 (または領域) 内に存在する近似零点を求める。

1. 区間内の直交多項式 (またはラグランジュ補間子) を展開基底として採用。
2. 関数 F を基底の線型結合で展開した多項式 P で近似。
3. P の展開係数から随伴行列を構成し、行列固有値を解いて P の零点を得る。
4. 区間 (または領域) の近傍に在る P の零点を関数 F の近似零点とする。

Basis-set Expansion of the Equation and the Matrix Eigenproblem

Murakami Hiroshi

Dep. Math. and Info. Sci., Tokyo Metropolitan University

The companion method for the algebraic equation constructs the matrix that represents the action of the multiplication of the root over the polynomial basis, and the matrix eigenvalues are solved as the roots. In this report, the further applications of this companion method is studied. The approximate zeros of the given function F of good behavior in the specified interval (or region) are solved by the following steps.

1. The orthogonal polynomials (or the Lagrange interpolants) in the interval are chosen as the expansion basis.
2. The function F is approximated by the polynomial P in the linear combination of the basis up to m-th degree.
3. The companion matrix is constructed from coefficients of P in the basis, and the zeros of P are obtained as the eigenvalues of the matrix.
4. The zeros of P located in the neighborhood of the interval are assigned as the approximate zeros of the function F.

1 導入

代数方程式を解くための随伴行列法 (コンパニオン法) は、方程式の根 x を多項式基底に乗じる作用を表現した行列を構成し、行列の固有値として方程式の根を得る方法である。今回は、与えられた区間内で振舞の良い連続関数 F の近似零点を求める為に、連続関数の基底展開 (補間) による多項式近似の構成法と基底展開に対応した (一般化) 随伴行列の構成法とを組み合わせた方法を考察する。

振舞の良い連続関数 F の零点をある区間 (領域) 内で求めたいとする。区間 (領域) 内で F を線形独立性の高い多項式基底を多く用いて展開すれば、F の良い近似を与える近似多項式が得られる。

- **直交多項式を展開基底に用いる場合:** 指定した区間上の (ある重み関数に伴う) 直交多項式を展開基底にとる。振舞の良い連続関数 F を区間内で基底の線形結合により展開し、m 次の展開項までの多項式を $F^{(m)}$ とする。

  $F^{(m)}$ の線形結合の係数から随伴行列を作れば、その固有値が $F^{(m)}$ の零点である。
- **ラグランジュ補間の基底多項式を展開基底に用**

いる場合: 指定した区間内の $(m+1)$ 個の分点の組 $\{\beta\}$ の上のL-補間子を展開基底にとる。振舞の良い関数 F の分点の組 $\{\beta\}$ 上の値からL-補間により得た多項式より (便宜上主係数1に規格化して) 多項式 $F^{(m)}$ を作る。

L-補間子の多項式基底上で表現した $F^{(m)}$ の随伴行列を作ると、その固有値は $F^{(m)}$ の零点である。

いずれも、区間内で多項式 $F^{(m)}$ が F の関数値を良く近似すれば、$F^{(m)}$ の区間内にある零点 x は ($F(x)$ の値が0に近いので) 関数 F の近似零点となる。

2 直交多項式基底による随伴行列

解きたい代数方程式の n 次多項式を $f(x)$、主係数を $lc(f)$ とする。区間 (a,b) 内での (重み関数 $w(x)$ に関する) 直交関数列の最初の n 個を $\phi_0(x),\cdots,\phi_{n-1}(x)$ とする。$\phi_k(x)$ は x の k 次多項式である。

$f(x)$ の直交多項式展開 $f(x)=\sum_{j=0}^{n} F_j\,\phi_j(x)$ の係数は、$F_j\equiv(\phi_j,\,f)_w/(\phi_j,\,\phi_j)_w$ である。基底の主係数を1にとったから、F_n は $f(x)$ の主係数に等しい。

多項式 $f(x)$ の根を固有値とする行列を随伴行列法で構成するため、$\mathrm{mod}\,f(x)$ で還元する条件の下、基底に x を乗じる作用を行列 A によって線型表現する。

関係式 $x\cdot\phi_k(x) = \sum_{j=0}^{n-1} a_{k,j}\phi_j(x) \bmod f(x)$ に於いて、次数の比較から $k=0,\cdots,n-2$ までは $\mathrm{mod}\,f(x)$ での還元は起こらず、$x\cdot\phi_k(x)=\sum_{j=0}^{n-1}\,a_{k,j}\,\phi_j(x)$ が成立する。

主係数1の直交多項式に対する三項漸化式は:

$$\begin{cases} \phi_0(x)=1,\ \phi_1(x)=x-\alpha_0 \\ \phi_{k+1}(x)=(x-\alpha_k)\phi_k(x)-\beta_k\phi_{k-1}(x)\ \ (k\geq 1) \end{cases}$$

である。(係数は $\alpha_k=(x\phi_k,\phi_k)_w/(\phi_k,\phi_k)_w$, $\beta_k=(\phi_k,\phi_k)_w/(\phi_{k-1},\phi_{k-1})_w>0$. 但し $(*,*)_w$ は区間内の重み $w(x)>0$ による関数内積。) よって

$$\begin{cases} x\cdot\phi_0(x)=\alpha_0\phi_0(x)+\phi_1(x), \\ x\cdot\phi_k(x)=\beta_k\phi_{k-1}(x)+\alpha_k\phi_k(x)+\phi_{k+1}(x) \\ \ (1\leq k\leq n-2), \end{cases}$$

このことから、線形表現の n 次の正方行列 A は特殊な下ヘッセンベルグ形を持ち、右上副対角要素の値が全て1の (非対称) 三重対角行列に最後の行を追加した構造を持つことがわかる。

$k=n-1$ の場合は $\phi_n(x) \bmod f(x) = \phi_n(x) - f(x)/F_n = -\sum_{j=0}^{n-1}(F_j/F_n)\phi_j(x)$ で、三項漸化式と合わせると $x\cdot\phi_{n-1}(x) \bmod f(x) = \beta_{n-1}\phi_{n-2}(x) + \alpha_{n-1}\phi_{n-1}(x) - \sum_{j=0}^{n-1}(F_j/F_n)\phi_j(x)$。

以上より随伴行列 A の要素 $a_{i,j}$ は (行と列の番号は $0,\cdots,n-1$)、

- 最初の行 ($i=0$): $j=0$ では α_0、$j=1$ では1、それ以外は0。
- 途中の行 ($0<i<n-1$): $j=i-1$ のとき β_i、$j=i$ では α_i、$j=i+1$ では1、それ以外は0。
- 最後の行 ($i=n-1$): j 列目の要素は $g_j\equiv -F_j/F_n+\beta_{n-1}\,\delta_{j,n-2}+\alpha_{n-1}\,\delta_{j,n-1}$。

展開係数 F_k $(k=0,\cdots,n)$ から随伴行列 A は

$$A=\begin{bmatrix} \alpha_0 & 1 & & & \\ \beta_1 & \alpha_1 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \beta_{n-2} & \alpha_{n-2} & 1 \\ g_0 & \cdots & g_{n-3} & g_{n-2} & g_{n-1} \end{bmatrix}$$

2.1 近似多項式の随伴行列

振舞の良い関数 $F(x)$ の直交展開の m 次の項までをとった多項式を $F^{(m)}(x)$ とする。$F^{(m)}(x)\equiv\sum_{j=0}^{m}F_j\phi_j(x)$.

多項式 $F^{(m)}(x)$ の零点を随伴行列法により解く。$F^{(m)}(x)$ の随伴行列 $A^{(m)}$ は上記の多項式 f 場合の随伴行列 A で、n を m に置き換えたものとして同様に構成できる。

係数 F_m の値が極度に0に近いと $A^{(m)}$ の固有値計算の過程で困難の生じる可能性がある。

また関数 $F(x)$ が良い性質 (例えば高階の導関数の存在や、解析性) を持つ場合は、直交展開係数 F_j は急減少し、ある項数から先の展開係数の計算値は、計算誤差に覆われ有効桁数を急速に失う。そのため高次項まで求めるのに高精度演算が必要になる。実際には展開項が急減少の場合は、少ない項で既に十分良い近似が得られる。

区間内での関数 $F(x)$ の振舞が良ければ、比較的少次の m 次までの展開項で止めた多項式 $F^{(m)}(x)$ が $F(x)$ を良く近似することが期待できるので $F^{(m)}(x)$ の随伴行列 $A^{(m)}$ の区間近傍にある固有値として $F(x)$ の近似零点が得られると期待できる。(展開の収束領域から外れた固有値は捨てる。)

3 例:ルジャンドル多項式展開

基底にルジャンドル多項式 $P_k(x)$ をとって考察する。$P_k(x)$ は区間 $[-1,1]$ 上で定義され定数1の重み

関数に対応する直交多項式である。ここまでの説明とは異なり、主係数は1ではなく $(P_k, P_k) = 2/(2k+1)$ と規格化する。

$$\begin{cases} P_0 = 1,\ P_1 = x, \\ P_{k+1} = \dfrac{2k+1}{k+1}\, x\, P_k - \dfrac{k}{k+1}\, P_{k-1} \ \ (k\geq 1). \\ \text{正規化条件}: (P_k, P_k) = 2/(2k+1). \\ \text{主係数}: lc(P_k) = (2k-1)!!/k! = 2^{-k}\, 2k!/(k!)^2. \\ k\to\infty \text{ のとき } lc(P_k) \approx 2^k\sqrt{\pi k}. \end{cases}$$

3.1 多項式の随伴行列

n 次の多項式 f の零点を随伴行列法により求める。f のルジャンドル多項式による基底展開を $f = \sum_{j=0}^{n} F_j\, P_j(x)$ とする。

随伴行列を求めるために n 個の基底 $P_k, k = 0, \cdots, n-1$ に x を乗じて $\bmod f$ で還元すると、($\beta_k = k/(2k+1)$, $\gamma_k = (k+1)/(2k+1)$ と置いて)

$$\begin{aligned} &x\cdot P_0 = \gamma_0 P_1\ , \\ &x\cdot P_k = \beta_k P_{k-1} + \gamma_k P_{k+1}\ \text{但し}\ (0 < k < n-1)\ , \\ &x\cdot P_{n-1} \ = \beta_{n-1}P_{n-2} + \gamma_{n-1}(P_n \bmod f \\ &\quad = \beta_{n-1}P_{n-2} - \gamma_{n-1}\textstyle\sum_{j=0}^{n-1}(F_j/F_n)P_j\ . \\ &\quad = \textstyle\sum_{j=0}^{n-1} g_j P_j\ . \end{aligned}$$

f の基底展開の係数 F_j を用いて $g_j \equiv \beta_{n-1}\,\delta_{j,n-2} - \gamma_{n-1}F_j/F_n$ を計算すると、随伴行列 A は (行と列の番号を基底関数の添字 $0, \cdots, n-1$ に対応させて)

$$A = \begin{bmatrix} 0 & \gamma_0 & & & \\ \beta_1 & 0 & \gamma_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \beta_{n-2} & 0 & \gamma_{n-2} \\ g_0 & \cdots & g_{n-3} & g_{n-2} & g_{n-1} \end{bmatrix}$$

となる。(随伴行列の最終行以外の対角要素が全て0なのは、基底多項式が偶数次なら偶関数で奇数次なら奇関数だからである。)

随伴行列 A の固有値を解くと多項式 f の零点が(必要なら全て)求まる。

多項式 f が係数で与えられているのではなくて、x に対する $f(x)$ の計算手続きとしてだけ与えられている一般的な状況では、展開係数 F_j は求積法によって求めることになる。関数内積 $(u, v) \equiv \int_{-1}^{1} u(x)\,v(x)\,dx$ を用いると係数は $F_j = (P_j, F)/(P_j, P_j) = (2j+1)/2\,(P_j, F)$, $(j = 0, \cdots, n)$ である。

f が n 次の多項式、P_j は j 次多項式 $(j\leq n)$ だから積 $P_j(x)F(x)$ は高々$2n$ 次式である。例えば、ガウス-ルジャンドル (G-L) 求積法の N 点公式は $(2N-1)$ 次以下の多項式の積分は正確である。そこで $N > n$ のとき N 分点の G-L 求積法を用いると係数 F_j $(j = 0, \cdots, n)$ の値が正確に求められる。

3.2 近似多項式の随伴行列

振舞の良い関数 F をルジャンドル多項式により直交展開し、その m 次の項までをとった F の近似多項式を $F^{(m)}$ とする。$F^{(m)}(x) \equiv \sum_{j=0}^{m} F_j P_j(x)$.

多項式 $F^{(m)}$ の零点を随伴行列法で解く。$F^{(m)}$ の随伴行列 $A^{(m)}$ は、上記の F の随伴行列 A で n を m と置き換えたものとして同様に構成できる。

関数 F は多項式ではないから、通常係数 F_j は求積法では正確には求められないが、誤差を含む近似値で代用する。もともと展開項を打ち切る誤差もあるので正確でなくても良いことにする。

区間内の関数 F の振舞が良ければ展開係数はそれだけ急に減少し、展開の誤差は項数が十分大きければ0に近ずく。そこで F をあたかも適当に決めた n 次 $(n\geq m)$ の多項式と見なして、被積分関数が $(n+m)$ 次以下の多項式に対して正確な求積法を用いる。例えば $N = \lceil (n+m+1)/2 \rceil$ と置くとき、G-L 求積法で N 分点あるいはそれ以上の公式を用いる。関数評価の回数である分点数を極力押さえ、求める項数 m を様子を見ながら段階的に増やしたい場合には、既に求めた関数値を再利用する求積法 (Gauss-Kronrod 求積法など) が能率的であろう。

展開係数 (の近似値を) 多めに求めておいて、その中から近似多項式として m 次の項までを取り込み、その先の項を無視するのが妥当かを展開係数を見て確認すれば、より安心できる。

4 例:チェビシェフ多項式展開

チェビシェフ (第一) 多項式は $x = \cos t$ と置くと、$T_k(x) = \cos(kt)$ で、$T_{-k} = T_k$。$T_0(x) = 1$, $T_1(x) = x$, $T_2(x) = 2x^2 - 1$ 等。T_k の主係数は $k = 0$ のとき1、$k > 0$ のとき 2^{k-1}。

x を乗じる三項関係式は: $x\cdot T_k(x) = \cos t\cdot \cos nt = 1/2\cdot\cos(k+1)t + 1/2\cdot\cos(k-1)t = 1/2\cdot T_{k+1}(x) + 1/2\cdot T_{|k-1|}(x)$。

4.1 多項式の随伴行列

区間 $[-1,1]$ でチェビシェフ多項式の基底による多項式 f の随伴行列を構成し、多項式の零点を固有値解法に帰着させる。

n 次 $(n > 0)$ の多項式を f とする。選点直交性 (あるいは $(n+1)$ 分点の Chebyshev-Gauss 求積法が $2n+1$ 次式を正確に積分) より、展開 $f(x) = \sum_{j=0}^{n} F_j T_j(x)$ の係数の値は $F_0 = 1/(n+1)\sum_{\ell=0}^{n} f(x_\ell)$, $F_k = 2/(n+1)\sum_{\ell=0}^{n} f(x_\ell) T_k(x_\ell)$ $(k = 1,\cdots,n)$ により求まる。但し分点 x_ℓ は $T_{n+1}(x)$ の $(n+1)$ 個の零点 $\cos((\ell+1/2)\pi/(n+1))$ である。

$$
\begin{aligned}
&x T_{n-1}(x) \bmod f(x) \\
&= 1/2\, T_{|n-2|}(x) + 1/2\,(T_n(x) \bmod f(x)) \\
&= 1/2\, T_{|n-2|}(x) + 1/2\left(-\textstyle\sum_{j=0}^{n-1}(F_j/F_n)T_j(x)\right) \\
&= \textstyle\sum_{j=0}^{n-1} g_j T_j(x).
\end{aligned}
$$

多項式 f の随伴行列 A は、f の展開係数 F_k $(k = 0,\ldots,n)$ から $2g_j = -(F_j/F_n) + \delta_{j,|n-2|}$ を求めて

$$
A = \begin{bmatrix}
0 & 1 & & & \\
1/2 & 0 & 1/2 & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & 1/2 & 0 & 1/2 \\
g_0 & \cdots & g_{n-3} & g_{n-2} & g_{n-1}
\end{bmatrix}
$$

4.2 関数の近似多項式の随伴行列

区間 $[-1,1]$ での振舞の良い関数 F のチェビシェフ展開を $F(x) = \sum_{j=0}^{\infty} F_j T_j(x)$ とし、その m 次の項までとった近似多項式を $F^{(m)}(x) = \sum_{j=0}^{m} F_j T_j(x)$ とする。上の多項式 f の場合の随伴行列 A に於いて n を m と読み替えると、多項式 $F^{(m)}$ の随伴行列 $A^{(m)}$ が得られる。

F の零点を求めたい区間 $[-1,1]$ の近傍に於いて、多項式 $F^{(m)}$ が F の関数値を良く近似すれば $F^{(m)}$ の零点は F の近似零点である。

N 分点の C-G 求積法の公式 $\int_{-1}^{1}\frac{f(x)dx}{\sqrt{1-x^2}} = \frac{\pi}{N}\sum_{\ell=1}^{N} f(\cos(\frac{2\ell-1}{2N}\pi)) + \frac{2\pi}{2^{2N}(2N)!}D^{2N}f(\xi)$ を $f(x) = F(x)T_k(x), k = 0,\cdots,m$ に適用しても関数 F が多項式でないので係数 F_j の正確な値は得られないが、係数の急減少性を仮定して m より大きい N を決め、F を N 次多項式と見なして N 分点の Gauss-Chebyshev 求積法を用いれば m 次以下の係数の近似値が求まる。

5 例:複素円周上の基底展開

いま閉区間として 0 を中心とする複素円周 $|z| = r > 0$ をとり、エルミート対称正定値な内積を ($*$ は複素共役を表す)、$(u,v) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} u(re^{i\theta})^* v(re^{i\theta})d\theta$ と定義すると、単項式 $\phi_k(z) = (z/r)^k$ が正規直交多項式であるとわかる。

5.1 多項式の随伴行列

f が n 次の多項式で、f の通常の係数による表示が $f(z) = \sum_{j=0}^{n} c_j z^j$ ならば、直交展開の係数 F_k=(ϕ_k, f) は F_k=$r^k c_k$ で、展開は $f = \sum_{k=0}^{n} F_k\phi_k$ となる。(実際には多項式 f の係数 c_j は与えられず、f の値を求める手続きだけが利用できると仮定する。) そこで、求積法で内積 (ϕ_k, f) を求める。「最良公式」は台形公式 (分点が半径 r の円周上の q 等分点、重みは定数 $1/q$) となる。q 点公式は z と z^* についてそれぞれ $q-1$ 次以下の多項式に対して正確。$k \le n$ 全てについて係数 F_j を求める為には、$q \ge n+1$ であれば良い。(もちろん数学公式としては正確でも F_k の数値計算は誤差を伴う。)

$$
\begin{cases}
z\cdot\phi_k = r\phi_{k+1}, \text{ for } k = 0,\cdots,n-2 \\
z\cdot\phi_{n-1} = r\phi_n \bmod f = -(r/F_n)\sum_{j=0}^{n-1} F_j\phi_j(z)
\end{cases}
$$

だから、多項式 f の円周上の値だけから積分で求められる係数 F_j を使って $g_j = -F_j/F_n$ (これは $-r^{j-n}c_j/c_n$ に等しい) と置くと、通常のフロベニウス型の f の随伴行列 A が得られる。

$$
A = r\begin{bmatrix}
0 & 1 & & & \\
 & 0 & 1 & & \\
 & & \ddots & \ddots & \\
 & & & 0 & 1 \\
g_0 & g_1 & \cdots & g_{n-2} & g_{n-1}
\end{bmatrix}
$$

円周の中心を 0 以外にとる場合の議論も同様である。

5.2 関数の直交多項式展開の随伴行列

0 を中心とする半径 r の円盤上で正則な解析関数 F の直交展開を $F = \sum_{k=0}^{\infty} F_k\phi_k$ とし、展開の m 次項までとった多項式を $F^{(m)}$ とする。直交展開の係数は F_k=(ϕ_k, F)。そのとき $g_j = -F_j/F_m$ と置くと、多項式 $F^{(m)}$ の零点は m 次のフロベニウス型随伴行列の固有値であることは上記と同様である。展開係数 F_k は円周上の関数 F の値だけから積分で求められる。多項式でない任意の関数 F の積分は求積

法では数学的に正確に求まらないが、精度を任意にあげて求めることは可能である。台形公式では分点数の逆数 h の任意の多項式よりも早く近似誤差が減少することが知られている。

6 ラグランジュ補間による近似

振舞の良い関数 F に対して、零点を求めたい区間内(あるいは複素領域内)でラグランジュの補間を用いて F を近似する多項式を構成し、その根を随伴行列法で解き区間近傍の F の近似零点を求める方法を考察する。

F がその零点を求めたい区間(あるいは複素領域)に於て、比較的低次の多項式により良く近似できる場合に、その区間(あるいは複素領域)の内部あるいは付近に $(m+1)$ 個の分点を配置する。分点集合 $\{\beta\}$ の上の m 次のラグランジュ補間の基底多項式を $b_p(x)=\prod'_{j\,(\neq p)}(x-\beta_j)$ にとる。

与えられた振舞の良い関数 F に対して、分点集合 $\{\beta\}$ 上で得た F の値から F を補間近似する m 次多項式を作る。更に(都合上)その多項式の主係数を 1 に規格化したものを $F^{(m)}$ とする。

$$F^{(m)}(x) = \left\{\sum_{p=1}^{m+1} F(\beta_p)\,\frac{b_p(x)}{b_p(\beta_p)}\right\} \Big/ \sum_{p=1}^{m+1} \frac{F(\beta_p)}{b_p(\beta_p)}$$
$$= \sum_{p=1}^{m+1} \gamma_p\, b_p(x)\,.$$

上式の係数 γ_p は値 $g_p \equiv F(\beta_p)/b_p(\beta_p)$ を用いると $\gamma_p \equiv g_p \Big/ \sum_{q=1}^{m+1} g_q$ と書ける。分点集合 $\{\beta\}$ が決めたらあらかじめ $\gamma_p\ (p=1,\cdots,m+1)$ を一度だけ計算しておけば、x が与えられたときに $F^{(m)}(x)$ の値を素早く求めることが出来る。

今度はこの $F^{(m)}$ の根を求めるために、m 個の相異なる分点の集合 $\{\alpha\}$ の上の $(m-1)$ 次のラグランジュ補間の基底 $B_q(x)=\prod'_{\ell\,(\neq q)}(x-\alpha_\ell)$, $q=1,\cdots,m$ を考える。x を乗じる作用を基底 B_q 上で制限 $\bmod F^{(m)}(x)$ の下で表現する行列を $A^{(m)}$ とすると、$x{\cdot}B_q(x)=\sum_{s=1}^{m} a^{(m)}_{q,s}\,B_s(x)+F^{(m)}(x)$ となる。この両辺の値を分点 α_ℓ に於いて比較すれば m 次行列 $A^{(m)}$ が $a^{(m)}_{q,\ell}=\alpha_\ell\,\delta_{q,\ell}-F^{(m)}(\alpha_\ell)\Big/B_\ell(\alpha_\ell)$ と決まる。随伴行列 $A^{(m)}$ の固有値は多項式 $F^{(m)}$ の零点である。$A^{(m)}$ の固有値は行列の通常の固有値解法を用いて求めることが出来る。もしくは m 個の分点 $\{\alpha\}$ を Durand-Kerner の反復:

$$\begin{cases} \tau_k \leftarrow F^{(m)}(\alpha_k)\Big/B_k(\alpha_k) = \dfrac{F^{(m)}(\alpha_k)}{\prod'_{j\,(\neq k)}(\alpha_k-\alpha_j)}\,, \\ \alpha_k \leftarrow \alpha_k - \tau_k \end{cases}$$

により動かし、収束させても多項式 $F^{(m)}$ の零点が得られる。

振舞の良い関数 F を区間(あるいは領域)内の $(m+1)$ 個の分点 $\{\beta\}$ でラグランジュ補間近似(便宜上更に主係数を 1 に規格化)したものが多項式 $F^{(m)}$ で、区間(あるいは領域)内での $(m+1)$ 個の分点 $\{\beta\}$ の分布が(例えば直交多項式の零点を分点集合に取るなどで)適切ならば、分点数 m を近傍の零点の個数に比べて十分に大きくとるとき、関数 F の値は多項式 $F^{(m)}$ により良く近似されると期待できる。そのとき多項式 $F^{(m)}$ の零点は F の近似零点になると期待できる。$A^{(m)}$ の固有値のうちで区間(あるいは領域)の近傍にあるものだけが近似零点としての意味を持つ。

7 数値実験例

例 1: 関数 $F(x)=\cos(100x^2-50x)$ の区間 $[-1,1]$ 内の零点は正確には 68 個ある。F のチェビシェフ展開の係数を(近似的に)求め、その m 次の項までをとった多項式 $F^{(m)}$ の零点を展開係数から組み立てた随伴行列の固有値として求めた。固有値は行列をバランシングした後にダブル QR 反復法を用いて計算し、区間 $[-1,1]$ 内の固有値を F の近似零点とした。近似零点の個数と、全近似零点での $|F|$ の最大値を揚げる(表 1)。零点が区間内に多数あり、展開項が零点の個数の数倍程度必要であったが、零点の個数は表中の次数 $m=130$ 以降では正しく出ている。また近似零点に於ける残差の最大値が、展開次数を上げるとチェビシェフ展開の係数と共に減少する様子を値の対数グラフで確認できる(図 1)。$m=200$ では 68 個の近似零点での関数の残差は全て 1.3E-11 以下に押さえられている。計算には倍精度(IEEE64 ビット浮動小数点数)を用いた。

例 2: ルジャンドル展開とそれに対応した随伴行列を用いて区間 $[-1,1]$ 内での関数 $F(x)=\cos(3\pi x^2)\exp(-x^3)/\sqrt{1+x^2}$ の近似零点を求めた例を示す。展開次数 $m=10,20,30,40,50$ の場合の近似零点での残差の最大値を示す(表 2)。$[-1,1]$ 内の近似零点の個数は 6 個であった。$m=40$ で F の残差は全て 3.3E-12 以下に押さえられている。計算には倍精度を用いた。

例 3: ルジャンドル展開により区間 $[-1,1]$ 内での関数 $F(x) = \sin(3\pi\log(2+X))$ の近似零点を求めた例を示す。展開次数 $m = 10, 20, 30, 40$ の場合の近似零点での残差の最大値を示す (表 3)。各場合の近似零点の個数は 4 個であった。$m = 40$ で F の残差は全て 7.7E-15 以下に押さえられている。計算には倍精度を用いた。

表 1: 展開次数と零点の個数、残差の最大値

次数 m	零点の個数	$\max_i \lvert F(x_i)\rvert$
100	62	1.0E-00
120	66	1.0E-00
130	68	4.7E-01
140	68	1.4E-01
150	68	1.1E-02
160	68	5.9E-04
170	68	1.4E-05
180	68	1.3E-07
190	68	1.2E-09
200	68	1.3E-11
210	68	3.1E-12
220	68	1.4E-12
230	68	1.9E-12

図 1: 展開係数の絶対値と近似零点での残差の最大値.

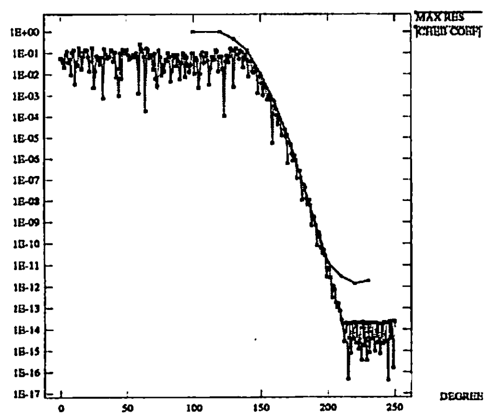

表 2: 展開次数と残差の最大値

次数	残差の最大値
10	1.1E-01
20	4.4E-04
30	3.0E-06
40	3.3E-12
50	4.8E-14

表 3: 展開次数と残差の最大値

次数	残差の最大値
10	2.0E-02
20	5.3E-08
30	4.5E-13
40	7.7E-15

参考文献

[1] 村上 弘 :「一変数代数方程式の行列解法とその周辺」情報処理学会研究報告, 2005-HPC-102, pp.1-6 (2005).

[2] 杉原正顕、室田一雄:「数値計算法の数理」, 第 7 章:'最小 2 乗法と直交多項式', 岩波書店, (1994).

[3] 森正武 :「数値解析」, 第 4 章:'関数近似', 共立出版, (1973).

[4] 森口繁一、宇田川■久、一松信: 「数学公式 III ―― 特殊函数 ――」, 第 IV 篇 : '直交多項式', 岩波全書, (1960). (漢字■は' 金' へんに' 圭')

[5] 二宮市三 監修: *NUMPAC(名古屋大学数学パッケージ)*, 「ライブラリ・プログラム利用の手引 (数値計算編)」,VOL. 1, 2, 3, 名古屋大学大型計算機センター, (1991).

[6] 山内二郎・宇野利雄・一松 信、共編 : 「電子計算機のための数値計算法 I」, 第 5 章:'函数計算', 培風館, (1965). 「電子計算機のための数値計算法 III」, 培風館, (1972).

[7] Davis P. J. and Rabinowitz P., *Methods in Numerical Integration*, Academic Press, 1975. 邦訳: 森正武「計算機による数値積分法」, 日本コンピュータ協会, (1981).

[8] Alan Edelman and Hiroshi Murakami, "Polynomial Roots from Companion Matrix Eigenvalues", Math. Comp., Vol.64, No.210, pp.763-776 (1995).

[9] Golub G. H. and Van Loan C. F.: *Matrix Computations*, 3rd Ed., Chap.7:'The Unsymmetric Eigenvalue Problem', The Johns Hopkins Univ. Press, Baltimore, Maryland, (1996).

[10] Wilkinson J. H. and Reinsch C., eds.: *Handbook for Automatic Computation, Vol.2, Linear Algebra*, Part II:'The Algebraic Eigenvalue Problem', Springer-Verlag, New York, (1971).

[11] Theodore J. Rivlin: *An Introduction to the Approximation of Functions*, Dover Pub. Inc., New York, (1969).

[12] Cheney E. W.:*Introduction to Approximation Theory*, 2nd Ed., Chap.3:'Tchebycheff approximation by polynomials and other linear families', A.M.S. Chelsea Pub, (1982).

[13] David Gottlieb and Steven A. Orszag: *Numerical Analysis of Spectral Methods – Theory and Applications*, Sec. 3:'Survey of Approximation Theory', CBMS 26, SIAM, (1977).

[14] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling and Brian P. Flannery, *Numerical Recipes in Fortran77*, 2nd Ed., Chap 4.5: 'Gaussian Quadratures and Orthogonal Polynomials', Cambridge Univ. Press, (1992).