与えられた区間における 非線形方程式の全解計算法

M2006MM006 堀場 慎吾

指導教員　杉浦 洋

1　はじめに

科学技術の分野において，非線形方程式 $f(x)=0$ の解を求める問題がたびたび現れる．

本論文では，非線形方程式の零点を求める方法として，Graeffe 変換法を紹介する．これは多項式に対する Graeffe 変換 [1] を解析関数に拡張することによって，単位円周上の零点を求める方法である．またそれを FFT(Fast Fourier Transform) によって高速に計算する事が可能になる．

さらに，区間 $[-1,1]$ の全ての零点を求める実 Graeffe 法についても述べる．これは，ある変数変換を介して複素 Graeffe 法と等価である．

最後に，数値実験によりその有効性を確認する．

2　高速 Fourier 変換による関数近似

2.1　複素離散型 Fourier 変換

周期 2π の解析的周期関数 $f(t)$ の関数近似には，分点 $t_l=2\pi l (0\le l<n)$ 上の離散型 Fourier 展開

$$f_n(t)=\sum_{k=-m}^{n-m-1} c_k e^{ikt}\cong f(t),\ c_k=\frac{1}{n}\sum_{l=0}^{n-1} f_l e^{-\frac{2\pi i}{n}kl}$$

が用いられる．ここで，標本値 $f_l=f(t_l)$ $(0\le l<n)$ である．

離散型 Fourier 係数 $c_k(-\infty<k<\infty)$ は周期性 $c_{k+n}=c_k$ を持つ．整数 m は誤差が小さくなるように適切に定める．標本値 f_l $(0\le l<n)$，離散型 Fourier 係数 c_k $(0\le k<n)$ の関係は，

$$c_k=\frac{1}{n}\sum_{l=0}^{n-1} f_l e^{-\frac{2\pi i}{n}kl},\qquad f_l=\sum_{k=0}^{n-1} c_k e^{\frac{2\pi i}{n}kl}$$

である．標本値 $\{f_l\}$ から係数 $\{c_k\}$ を一斉に効率的に計算する算法が FFT(Fast Fourier Transform)，逆に係数 $\{c_k\}$ から関数値 $\{f_l\}$ を計算する算法が IFFT(Inverse FFT) である．計算量は，共に $O(n\log n)$ である．

被近似関数 $f(t)$ が解析的なら，$f_n(t)$ の精度は良好である．$f(t)$ が複素平面の幅 $2d$ の閉帯領域 $B_d=\{z||\mathrm{Im}\{z\}|\le d\}$ で解析的なら，

$$|f_n(t)-f(t)|=O(r^m+r^{n-m}), r=e^{-d}$$

である．

2.2　離散 Laurent 展開

関数 $f(z)$ が円環領域 $r\le|z|\le r^{-1}$ $(r<1)$ で解析的なとき，その関数近似には，離散型 Laurent 展開

$$f_n(z)=\sum_{k=-m}^{n-m-1} c_k z^k,\ \ c_k=\frac{1}{n}\sum_{l=0}^{n-1} f_l e^{-\frac{2\pi il}{n}}\ (0\le k<n).$$

が用いられる．標本値 $f_l=f(e^{2\pi il/n})$ である．変数変換 $z=e^{it}$ により，周期関数 $F(t)=f(z)$ の離散型 Fourier 展開を $F_n(t)$ とすると，$f_n(z)=F_n(t)$ となる．すなわち，FFT，IFFT は離散型 Laurent 展開の高速計算法でもある．また，誤差も複素 Fourier 変換の誤差理論により解析できる．

2.3　実離散型 Fourier 展開

関数 $f(t)$ が実解析的周期関数ならば，その近似には，実離散型 Fourier 展開，

$$f_{2n}(t)=\frac{1}{2}a_0+\sum_{k=1}^{n-1}(a_k\cos kt+b_k\sin kt)+\frac{1}{2}a_n\cos nt,$$

$$a_k=\frac{1}{n}\sum_{j=0}^{2n-1} f_l\cos\frac{2\pi kl}{n},\qquad b_k=\frac{1}{n}\sum_{j=0}^{2n-1} f_l\sin\frac{2\pi kl}{n},$$

が用いられる．標本値 $f_l=f(\pi l/n)$ $(0\le l<2n)$ である．

実離散型 Fourier 展開は，複素離散型 Fourier 展開の実部であるので，FFT により高速に計算できる．さらに，データの対称性を利用した効率的なアルゴリズムが，RFFT(Real FFT)，IRFFT(Inverse RFFT) である．その計算量は FFT，IFFT の約半分となる．

2.4　離散型 cosin 展開

関数 $f(t)$ が実偶関数ならば，離散型 Fourier 展開は，

$$f_{2n}(t)={\sum_{k=0}^{n}}'' a_k\cos kt,\ a_k=\frac{2}{n}{\sum_{l=0}^{n}}'' f_l\cos\frac{\pi kl}{n}(0\le k\le n)$$

となる．これを離散型 cosine 展開という．ここで，$\sum''$ は，初項と末項を半分にした総和である．この展開係数と関数値の計算は FCT(Fast cosine Transform)，IFCT(Inverse FCT) により，高速に遂行でき，演算量は RFFT，IRFFT のさらに半分である．

2.5　離散型 Chebyshev 展開

区間 $[-1,1]$ で定義された実連続関数を $f(x)$ とする．$F(t)=f(\cos t)$ は周期 2π の実周期偶関数であるので，離散型 cosine 展開

$$F_{2n}(t)={\sum_{k=0}^{n-1}}'' a_k\cos kt$$

は分点 $t_l=\pi l/n$ $(0\le l\le n)$ 上の $F(t)$ の補間である．両辺に $t=\cos^{-1}x$ を代入すると，離散型 Chebyshev 展開

$$p_n(x)=F_{2n}(\cos^{-1}x)={\sum_{k=1}^{n-1}}'' a_kT_k(x)$$

を得る．ここで，$T_k(x)=\cos(k\cos^{-1}x)$ は k 次 Chebyshev 多項式である．

この計算は，FCT，IFCT で高速計算可能で，計算量は，RFFT, IRFFT のさらにほぼ半分である．関数 $f(x)$ が楕円 $E_r = \{z \in \mathbf{C} \,|\, |z-1|+|z+1| = r + r^{-1}\} (r < 1)$ の内部及び円周上で解析的なら，誤差は

$$|p_n(x) - f(x)| = O(r^n) \ (x \in [-1, 1]).$$

3　単位円周上の零点問題

3.1　複素 Graeffe 変換

3.1.1　単位円周上の Graeffe変換

単位円周上の解析関数 $f(z)$ の m 重複素 Graeffe 変換を

$$f^{[m]}(z) = G_m f(z) = \prod_{j=0}^{m} f\left(\omega_m^j \sqrt[m]{z}\right)$$

で定義する．ここで Graeffe 変換の回数を μ とし，$m = 2^\mu$ である．

また，$\omega_m = e^{2\pi i/m}$ は原始 m 乗根である．特に $G = G_2$ を単に Graeffe 変換と呼ぶ．

n 次多項式 $f(z) = \prod_{l=0}^{n}(\alpha_l - z)$ の Graeffe 変換は，$G_m f(z) = \prod_{l=0}^{n}(\alpha_l^m - z)$ となり，零点の絶対値の比 $|\alpha_l|/|\alpha_k|$ が強調されて $|\alpha_l|^m/|\alpha_k|^m$ となる．

我々のアルゴリズムに対し，次の定理は本質的である．

定理 1 単位円周 $|z| = 1$ 上で，解析的な関数を $f(z)$ とし，その m 重 Graeffe 変換を $f^{[m]}(z)$ とする．$f(z)$ の単位円周上の零点を $\zeta_1, \cdots, \zeta_k$ とし，

$$p(z) = \sum_{k=1}^{K}(z - \zeta_k)$$

とする．このとき，ある整定数 L と，複素定数 C が存在して，

$$\frac{f^{[m]}(z)}{(-1)^{(m-1)L} C^m} \sim z^L p^{[m]}(z). \tag{1}$$

ここで $F^{[m]}(z) \sim G^{[m]}(z)$ は，$\lim_{m\to\infty} \dfrac{F^{[m]}(z)}{G^{[m]}(z)} = 1$ が単位円周上一様収束であることを意味する．

式 (1) により，m が大きい時に，$f^{[m]}(z)$ は，

$$z^L p^{[m]}(z) = z^L \sum_{k=0}^{K} c_k z^k$$

のほぼ定数倍に等しい．すなわち，この多項式の項数 $K + 1$ により，単位円周上の零点の個数 K がわかる．

3.2　高速複素 Graeffe 変換

$f(z)$ が単位円板上で，解析的な場合を考える．このとき，式 (1) の L は，単位円内部の零点の個数である．$f(z)$ の補間点 $\{\omega_n^l\}_{l=0}^{n-1}$ 上での補間多項式

$$f_{n-1}(z) = \sum_{k=0}^{n-1} a_k z^k, \ \ a_k = \frac{1}{n}\sum_{l=0}^{n-1} f_l \omega_n^{-kl} \ \ (0 \le k < n)$$

を作る．係数 a_k は，FFT により高速に計算できる．

次に $f_{n-1}(z)$ に対する，高速 Graeffe 変換のアルゴリズムを構成する．$f_{n-1}(z)$ の Graeffe 変換

$$g_{n-1}(z) = f_{n-1}^{[2]}(z) = \sum_{k=0}^{n-1} b_k z^k$$

を計算する．

単位円周上の零点の個数を求める高速 Graeffe 変換を以下のように処理する．

1. $f_l = f_{n-1}(\omega_{2n}^l) = \sum_{k=0}^{n-1} a_k \omega_{2n}^{kl} \ \ (0 \le l < 2n)$ を IFFT で計算する．
2. $g_l = f_l f_{n+l} \ \ (0 \le l < n)$ を計算する．
$$f_l f_{n+l} = f_{n-1}(\sqrt{\omega_n^l}) f_{n-1}(-\sqrt{\omega_n^l}) = g_{n-1}(\omega_n^l)$$
である．
3. $b_k = \frac{1}{n}\sum_{l=0}^{n-1} g_l \omega_n^{-kl} \ \ (0 \le k < n)$ を FFT で計算する．なお，この計算量は $O(n \log_2 n)$ である．

このアルゴリズムで

$$f_{n-1} \to f_{n-1}^{[2]} \to \cdots \to f_{n-1}^{[2^\mu]}$$

を順次計算することができる．

これで $p^{[m]}(z) (m=2^\mu)$ が求まった．その次数から，単位円周上の解の個数 K と，単位円内の解の個数 L が求まる．

3.3　単位円周上の零点を求めるアルゴリズム

m 重 Graeffe 変換後の多項式の解によって取り出した多項式 $p^{[m]}(z)$ の全ての根を求める．ここで得られた解 α は，元の方程式の解の $m = 2^\mu$ 乗になっているため，その m 乗根のすべてを，$f(z)$ に代入して，0 になったものを解とする．この処理も FFT で高速に計算可能である．α の偏角を $\theta = \arg(\alpha)$ とすると，求める解は，

$$\beta_l = e^{i(\frac{\theta}{m} + \frac{2\pi l}{m})}$$

のどれかとなる．数値計算では，これらを近似多項式 $f_{n-1}(z)$ に代入し，十分 0 に近くなった β_l を解とする．

$$f_{n-1}(\beta_l) = \sum_{k=0}^{n-1} a_k e^{ik(\frac{\theta}{m} + \frac{2\pi l}{m})} = \sum_{k=0}^{n-1}(a_k e^{ik\frac{\theta}{m}}) e^{\frac{2\pi i k l}{m}}.$$

これは，$a'_k = a_k e^{ik\frac{\theta}{m}}$ を係数とする離散型 Fourier 展開の，周期 2π の m 等分点の値であり，IFFT により高速に計算できる．しかし，計算効率を上げるため，項数 n と，$m = 2^\mu$ の大小関係によって，異なる前処理を行う．

I $m \geq n$ のとき，

$$f(\beta_l)=\sum_{k=0}^{m-1} a'_k e^{\frac{2\pi i k l}{m}},\ \ a'_k = a_k e^{\frac{k\theta}{m} i}\ \ (0 \leq l < m),$$
$$a'_k = 0\ \ (n \leq k < m)$$

とし，FFT で計算する．

II $m < n$ のとき，

$m = Jn\ \ k = jm + M$ とすると，

$$f(\beta_l)=\sum_{M=0}^{m-1}\sum_{j=0}^{J-1}\left(a_{jm+M} e^{\frac{(jm+M)\theta}{m} i}\right) e^{\frac{2\pi i}{m}(jm+M)l}$$
$$=\sum_{M=0}^{m-1} a'_k e^{\frac{2\pi i}{m} Ml},$$
$$a'_k=\sum_{j=0}^{J-1} a_{jm+M} e^{(j\theta+\frac{M}{m}\theta)i}$$

として，FFT で計算する．

いずれの場合も $f(\beta_l) = 0$ となった β_l が求める解となる．

4 有限区間上の零点問題

4.1 実 Graeffe 変換

$[-1, 1]$ で解析的な実関数 $f(x)$ の Chebyshev 展開を，

$$f(x) = {\sum_{k=0}^{\infty}}' a_k T_k(x) = \frac{1}{2} a_0 + \sum_{k=1}^{\infty} a_k T_k(x)$$

とする．これを $x = \frac{z+z^{-1}}{2}$ と変数変換したものを $F(z)$ とする．この $F(z)$ に 3 章の Graeffe 変換を適用し，単位円周上の零点の数 $2K$ を得れば，$f(x)$ は $[-1, 1]$ 上に K 個の零点を持つことがわかる．この操作を直接 $f(x)$ の実 Graeffe 変換 H として解釈する．$z = e^{it}$ とすると，

$$F^{[2]}(z)=GF(z)=f\left(\cos\frac{t}{2}\right) f\left(\cos\left(\frac{t}{2}+\pi\right)\right)$$
$$={\sum_{k=0}^{n}}'' b_k \cos kt={\sum_{k=0}^{n}}'' b_k T_k(x)=Hf(x).$$

これを一般化して，m 重実 Graeffe 変換 H_m を，以下のように定義する．

$$H_m f(x) = f^{[m]}(x) = G_m F(z)=\prod_{j=0}^{m-1} F\left(\omega_m^j \sqrt[m]{z}\right)$$
$$=\prod_{j=0}^{m-1} f\left(\cos\frac{2\pi j + t}{m}\right)=\prod_{j=0}^{m-1} f\left(\cos\frac{2\pi j+\cos^{-1} x}{m}\right).$$

$f(x)$ の $[-1, 1]$ の零点を β_l $(1 \leq l \leq K)$,

$$p(x) = \prod_{l=1}^{K}(x - \beta_l), \qquad f(x) = p(x)\tilde{f}(x)$$

とすると，$\tilde{f}(x)$ は $[-1, 1]$ で零点を持たない解析関数となる．

$$F(z) = p\left(\frac{z+z^{-1}}{2}\right)\tilde{f}\left(\frac{z+z^{-1}}{2}\right) = P(z)\tilde{F}(z)$$

おくと、式 (1) の左辺は，

$$\frac{F^{[m]}(z)}{(-1)^{(m-1)L}C^m} = \frac{P^{[m]}(z)\tilde{F}^{[m]}(z)}{(-1)^{(m-1)L}C^m}$$

となる．ここでは，$L = 0$ となるので，

$$\frac{f^{[m]}(x)}{C^m} = \frac{F^{[m]}(z)}{C^m} \sim P^{[m]}(z) = p^{[m]}(x).$$

さて，$\beta = \cos\tau = \frac{e^{i\tau}+e^{-i\tau}}{2} = \frac{\omega+\omega^{-1}}{2}$ とおくと，

$$(x-\beta)^{[m]}=\left(\frac{z+z^{-1}}{2} - \beta\right)^{[m]}=(-1)^{m-1}(x - \cos m\tau),$$
$$=(-1)^{m-1}(x - T_m(\beta))$$

である．よって，

$$p^{[m]}(x)=\prod_{l=1}^{K}(x-\beta_l)^{[m]}=(-1)^{K(m-1)}\prod_{l=1}^{K}(x-T_m(\beta_l)).$$

以上より，次の定理を得る．

定理 2 $f(x)$ が $[-1, 1]$ に K 個零点を持つのなら，$f^{[m]}(x)$ は，K 次多項式に近付く．

十分大きな m で，$f^{[m]}(x) \cong cp^{[m]}(x)$ である．$f(x)$ の零点を β_l $(0 \leq l \leq K)$ とすると，$p^{[m]}(x)$ の零点は，$\alpha_l = T_m(\beta_l)$ $(1 \leq l \leq K)$ である．すなわち，β_l は，代数方程式 $T_m(x) = \alpha$ の m 個の解の一つである．

4.2 高速実 Graeffe 変換

n が 2 の巾のとき，$f(x)$ の n 次離散型 Chebyshev 展開

$$f_n(x) = {\sum_{k=0}^{n}}'' a_k T_k(x) \cong f(x)$$

を求める．標本値 f_l，係数 a_k は，

$$f_l = f(\cos\frac{\pi l}{n}) = {\sum_{k=0}^{n}}'' a_k T_k(\cos\frac{\pi l}{n}) \quad (0 \leq l < m),$$

$$a_k = \frac{2}{n}{\sum_{l=0}^{n}}'' f(\cos\frac{\pi l}{n})\cos\frac{\pi k l}{n} \quad (0 \leq k < n)$$

となり，それぞれ IFCT，FCT で高速に計算できる．この計算回数は $O(n \log_2 n)$ である．

次に，$g_n(x) = f_n^{[2]}(x) = {\sum_{k=0}^{n}}'' b_k T_k(x)$ の係数 $\{b_k\}$ を以下のアルゴリズムで高速計算する．

1. $f_l = f_n(\cos\frac{\pi}{2n}l)$ $(0 \le l \le 2n)$ を IFCT で計算する．
2. $g_l = f_l f_{2n-l}$ $(0 \le l < n)$ を計算する．$f_l f_{2n-l} = f_n(\cos\frac{\pi}{2n}l) f_n(-\cos\frac{\pi}{2n}l) = g_n(\cos\frac{\pi}{n}l)$ となる．
3. $b_k = \frac{2}{n}\sum_{l=0}^{n}{}'' g_l \cos\frac{\pi k l}{n}$ $(0 \le k < n)$ を FCT で計算する．

このアルゴリズムで

$$f_n \to f_n^{[2]} \to \cdots \to f_n^{[2^\mu]} \cong p^{[m]}(x)$$

を順次計算することができる．
これで，$[-1,1]$ の解の個数が求められたので，その個数だけ解を求めることによって，我々の問題は解決する．

4.3 有限区間上の零点を求めるアルゴリズム

$m = 2^\mu$(μ は整数で Graeffe 変換の回数) とし，多項式 $P^{[m]}(z)$ の零点 $\alpha_1, \cdots, \alpha_K$ をなんらかの方法で求める．我々の数値実験では Durand-kerner 法を用いた．
$T_m(x) = \alpha_k$, $t = t_l = \dfrac{\tau + 2\pi l}{m}$, $x = \beta_l = \cos\dfrac{\tau + 2\pi l}{m}$ $(0 \le l < m)$ を f に代入し，$y_l = f(\beta_l) = 0$ となった β_l が解である．

$$\begin{aligned} y_l &= \sum_{k=0}^{n}{}'' a_k \left(\cos\frac{k\tau}{m}\cos\frac{2k\pi l}{m} - \sin\frac{k\tau}{m}\sin\frac{2k\pi l}{m}\right) \\ &= \sum_{k=0}^{n}{}'' a'_k \cos\frac{2\pi k l}{m} + \sum_{k=0}^{n}{}'' b'_k \sin\frac{2\pi k l}{m}. \end{aligned} \tag{2}$$

ここで，$a'_k = a_k \cos k\tau/m$, $b'_k = -a_k \sin k\tau/m$ である．これは，IRFFT で高速計算できる．

ここで，計算効率を上げるため，項数 n と，$m = 2^\mu$ の大小関係によって，異なる前処理を行う．

I $n < \frac{m}{2}$ のとき，

$$y_l = \sum_{k=0}^{m/2}{}'' a'_k \cos\frac{2k\pi l}{m} + \sum_{k=1}^{m/2-1}{}'' b'_k \sin\frac{2k\pi l}{m} \ (0 \le l < m)$$

を IRFFT で計算する．ただし，$a'_k = b'_k = 0$ $(n < k \le \mu/2)$, $a'_n \leftarrow a'_n/2$ とする．

II $n = m/2$ のとき，
式 (2) をそのまま IRFFT で計算する．

III $n = m$ のとき，
三角関数の対称性 $\cos(-x) = \cos x$, $\sin(-x) = -\sin x$ を用いて級数を畳む．すなわち，$a''_k = a'_k + a'_{\mu-k}$, $b''_k = b'_k + b'_{\mu-k}$ $(0 \le k \le m/2)$ により，

$$y_l = \sum_{k=0}^{m/2}{}'' a''_k \cos\frac{2k\pi l}{m} + \sum_{k=1}^{m/2-1}{}'' b''_k \sin\frac{2k\pi l}{m} \ (0 \le l < m)$$

と変形し，IRFFT で計算する．

IV $n > m$ のとき，
三角関数の周期性を用いて級数を縮める．すなわち，

$$\tilde{a}_k = \sum_{i=0}^{n/m-1} \tilde{a}_{im+k},\ \tilde{b}_k = \sum_{i=0}^{n/m-1} b'_{im+k} \ (0 \le k < m)$$

$$y_l = \sum_{k=0}^{m}{}'' \tilde{a}_k \cos\frac{2k\pi l}{m} + \sum_{k=1}^{m-1}{}'' \tilde{b}_k \sin\frac{2k\pi l}{m} \ (0 \le l < m)$$

と変形し，III に帰着させる．

5 数値実験

実 Graeffe 変換を用いて，$[-1,1]$ の解を求めるプログラムを **C** 言語で組み，数値実験を行った．関数，

$$f(z) = (z - 0.3)(z - 0.29999)\exp(z)$$

を用いて数値的に困難とされる近接零点の近似を行った．$f(z)$ の解は $z = 0.29999, 0.3$ である．

Fourier 展開の項数 $n = 32$，$\mu = 5$ 回 Graeffe 変換をかけ，その係数を出力し，第 3 章の理論に従って解釈した，

$m = 2^5 = 32$ のとき，
$|c_k| \le 10^{-14}$ $(k = 3, \cdots, 31$ のとき$)$
$c_0 \approx 1$
$c_1 \approx 0.6778556990232384$
$c_2 \approx 0.1788385174660971.$

よって $f_{n-1}(z)$ は，解が 2 個あることがわかる．Durand-Kerner 法 [2] を用いて二つの解

$$\alpha_1 = -0.9476342748563671,$$
$$\alpha_2 = -0.9475270937038849$$

を得た．これを用いて，$f_{n-1}(\beta_l)$ を計算し，10^{-10} 以下の値を 0 であると判断し，$f(x)$ の解とすると，

$$x = 0.2999900000400602, 0.2999999999596771$$

となった．誤差は共に 10^{-10} 以下である．

6 おわりに

複素平面単位円周上の解析関数の零点を全て求める複素 Graeffe 変換法と，実区間 $[-1,1]$ 上の解析関数の零点を全て求める実 Graeffe 変換法を提案した．それぞれについて，FFT を用いた高速変換アルゴリズムを開発し，**C** 言語で計算機実装と，数値実験を行った．

実験結果はおおむね良好で，零点の個数と，位置が理論通り計算できた．しかし，Graeffe 変換後に近接零点が現れ，近似の精度を劣化させるという問題点が発見された．この克服が今後の課題である．

参考文献

[1] Anthony Ralston and Philip Rabinowitz：A FIRST COURSE IN NUMERICAL ANALYSIS Second Edition, DOVER PUBLICATIONS,INC (2001).

[2] 山本哲朗：数値解析入門, サイエンス社 (1976).