3 種のモーメント問題の高速解法

M2015SS006 坂元　悠介

指導教員：杉浦洋

1　はじめに

2　背景

本研究で扱うモーメント問題は，複素平面に配置された複素質量を持つ n 個の質点のモーメントから，質点の位置や質量を求める問題である．これは数直線上のモーメント問題の素直な拡張である．

ここでは，3 種類のモーメント問題を考える．質点の位置が既知，質量が未知の問題を質量問題という．質点の質量が既知，位置が未知の問題を位置問題という．質点の位置と質量が共に未知の問題を位置質量問題という．

位置問題は，単純閉曲線内部の解析関数の零点を求める問題に現れる．また，位置質量問題は単純閉曲線内部の解析関数の 1 位の極とその留数を求める問題に現れる．

卒業論文 [1] では，質量問題に対する計算量 $O(n^2)$ の高速解法を提案した．本論文では，位置問題と位置質量問題の高速解法について研究した．

3　アプローチ

質量問題は，Vandelmonde 方程式，すなわち Vandermonde 行列を係数行列とする線形方程式である．Higham は [2] でこれを拡張した，一般化 Vandelmonde 方程式に対する計算量 $O(n^2)$ のアルゴリズムについて述べている．

位置問題と位置質量問題は非線形方程式である．これを Newton 法で解き，修正量を求めるための線形方程式の解法に，Higham のアルゴリズムを用いる方法を提案する．また，それらの有効性を検証するために数値実験を行う．

4　モーメント問題の背景

解析関数 $f(x)$ の，単純閉曲線 C の内部に存在するすべての零点を ζ_1, ⋯,ζ_m とする．

零点の個数は周回積分

$$m = \mu_0 = \frac{1}{2\pi i}\int_C \frac{f'(z)}{f(\mathrm{z})}dz$$

で計算できる．また零点の l 次モーメント

$$\mu_l = \sum_{l=1}^{m} \zeta_j^l \qquad (l \geq 1)$$

は，

$$\mu_l = \frac{1}{2\pi i}\int_C \frac{f'(z)z^l}{f(z)}dz \tag{1}$$

で計算できる [1]．したがって零点は，モーメント方程式

$$\sum_{j=1}^{m} \zeta_j^l = \mu_l \qquad (1 \leq l \leq m) \tag{2}$$

を ζ_j $(1 \leq j \leq m)$ について解けば求まる．

村井 [4]，上岡 [3] はそれを 1 変数代数方程式に変換して Aberth 法で解いた．この方法には，変換の際の数値誤差に対する懸念があるので，山田 [5] はモーメント方程式をそのまま m 次元 Newton 法で解いた．その際，計算量の増大が問題となった．

次に，解析関数 $f(z)$ の極配置の問題を考える．$f(z)$ が原点を囲む単純閉曲線 C の内部に特異点として，1 位の極 $\zeta_1, \cdots, \zeta_m$ のみをもち，その留数を $\rho_1, \cdots, \rho_m$ とする．極を質点，留数をその質量と見なすと，l 次モーメント

$$\mu_l = \sum_{j=1}^{m} \rho_j \zeta_j^l \qquad (l \geq 0) \tag{3}$$

が定義できる．このモーメントは C の周回積分により，

$$\mu_l = \frac{1}{2\pi i}\int_C f(z)z_j^{l-1}dz \qquad (l \geq 0) \tag{4}$$

で計算できる．したがって，C の内部の極とその留数は，モーメント方程式

$$\sum_{j=1}^{m} \rho_j \zeta_j^l = \mu_l \qquad (0 \leq l \leq 2m-1) \tag{5}$$

を解くことにより，求めることができる．

5　モーメント問題の定義

改めて，問題を定義する．質点 $\alpha_0, \alpha_1, \ldots, \alpha_n \in \mathbb{C}$ の質量を $w_0, w_1, \ldots, w_n \in \mathbb{C}$ とするとき，その i 次モーメントを

$$\mu_i = \sum_{j=0}^{n} w_j \alpha_j^i \qquad (i \geq 0) \tag{6}$$

で定義する．逆に，与えられたモーメントから点の位置 $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_0, \alpha_1, \cdots, \alpha_n)$ や質量 $\boldsymbol{w} = (w_0, w_1, \cdots, w_n)$ を求める問題をモーメント問題という．

次の 3 種のモーメント問題を考える．

- 質量問題：質量 $\boldsymbol{w}$ を求める問題.

$$\sum_{j=0}^{n} w_j \alpha_j^i = \mu_i \qquad (0 \leq i \leq n). \tag{7}$$

  位置 $\boldsymbol{\alpha}$ は既知である．

- 位置問題：位置 $\boldsymbol{\alpha}$ を求める問題.

$$\sum_{j=0}^{n} w_j \alpha_j^i = \mu_i \qquad (1 \leq i \leq n+1). \tag{8}$$

  質量 $\boldsymbol{w}$ は既知とする．

- 位置質量問題：位置 $\boldsymbol{\alpha}$ と質量 $\boldsymbol{w}$ を求める問題．

$$\sum_{j=0}^{n} w_j \alpha_j^i = \mu_i \qquad (0 \le i \le 2n+1). \tag{9}$$

方程式 (2) は，全ての質量が 1 のときの特殊な位置問題である．また，(5) は位置質量問題である．

6 Vandermond システム

Higham[2] は Vandermonde 行列 V を係数行列とする線形方程式を主問題，その転置行列 V^T を係数行列とした線形方程式を双対問題と呼び，その双方に対する計算量 $O(n^2)$ の高速解法を解説している．双対問題は単項式基底の Lagrange 補間と等価である．双対問題の $O(n^2)$ アルゴリズムが，差分商アルゴリと Newton 基底から単項式基底への基底変換により導かれる．

双対問題は，Lagrange 補間を Hermite 補間に拡張し，さらに展開基底を三項漸化式で生成される多項式基底とすることで一般化される．一般化双対問題の双対問題を一般化主問題という．一般化主問題の係数行列を，一般化 Vandermonde 行列という．

一般化双対問題に対しては，合流型差分商アルゴリズムと，Newton 基底から三項漸化式で生成される多項式基底への基底変換から， $O(n^2)$ アルゴリズムが得られる．

一般化双対問題のアルゴリズムを分析・再構成することで，一般化主問題の $O(n^2)$ アルゴリズムが得られる．

6.1 Vandermond システムの例

補間点 $\alpha_0, \cdots, \alpha_n$ 上の通常 Hermite 補間は $2n+1$ 次多項式

$$f(x) = \sum_{j=0}^{2n+1} a_k x^k$$

の係数 $a_0, \cdots, a_{2n+1}$ を Herimte 補間条件

$$\begin{aligned} f(\alpha_i) &= f_{2i}, \\ f'(\alpha_i) &= f_{2i+1} \qquad (0 \le i \le n) \end{aligned}$$

で決定する問題である．この方程式をベクトル表示すると，

$$Q^T \boldsymbol{a} = \boldsymbol{f} \tag{10}$$

となる．ここで

$$Q^T = \begin{bmatrix} 1 & \alpha_0 & \cdots & \alpha_0^{2n+1} \\ 0 & 1 & \cdots & (2n+1)\alpha_n^{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \alpha_n & \cdots & \alpha_n^{2n+1} \\ 0 & 1 & \cdots & (2n+1)\alpha_n^{2n} \end{bmatrix},$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{a} &= (a_0, \cdots, a_{2n+1}), \\ \boldsymbol{f} &= (f_0, \cdots, f_{2n+1}) \end{aligned}$$

である．

Q は一般化 Vandermond 行列の一種であり，方程式 (10) は一般化双対問題である．

Q^T，Q を係数行列とする方程式は，Highan の $O(n^2)$ アルゴリズムにより効率的に解かれる．

7 位置問題に対する Newton 法

モーメント問題の位置問題では，$\boldsymbol{w} = (w_0, w_1, \ldots, w_n)$ を与えられ，
モーメント方程式

$$f_k = \sum_{i=0}^{n} w_i \alpha_i^k - \mu_k = 0 \qquad (1 \le k \le n+1) \tag{11}$$

から，標本点 $\boldsymbol{\alpha} = \alpha_0, \alpha_1, \ldots, \alpha_{n+1}$ を求める．これは非線形方程式であるので Newton 法を用いて解く．Newton 法 (1 回反復）は

$$\boldsymbol{\alpha}_{new} = \boldsymbol{\alpha} - J^{-1} \boldsymbol{f}$$

である．ここで $\boldsymbol{f} = (f_1, f_2, \cdots, f_{n+1})$ であり，

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial \alpha_0} & \frac{\partial f_1}{\partial \alpha_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial \alpha_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial \alpha_0} & \frac{\partial f_2}{\partial \alpha_1} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial \alpha_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_{n+1}}{\partial \alpha_0} & \frac{\partial f_{n+1}}{\partial \alpha_1} & \cdots & \frac{\partial f_{n+1}}{\partial \alpha_n} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} w_0 & w_1 & \cdots & w_n \\ 2w_0\alpha_0 & 2w_1\alpha_1 & \cdots & 2w_n\alpha_n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ (n+1)w_0\alpha_0^n & (n+1)w_1\alpha_1^n & \cdots & (n+1)w_n\alpha_n^n \end{bmatrix}$$

は Jacobian 行列である．J は

$$J = BVW$$

と書ける．ここで，

$$B = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & n \end{bmatrix}$$

$$V = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \cdots & \alpha_n \\ \cdots & \cdots & & \cdots \\ \alpha_1^n & \alpha_2^n & \cdots & \alpha_n^n \end{bmatrix}$$

$$W = \begin{bmatrix} w_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & w_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & w_n \end{bmatrix}$$

である．V は Vandermond 行列である．ゆえに，

$$\boldsymbol{\alpha}_{new} = \boldsymbol{\alpha} - W^{-1} V^{-1} B^{-1} \boldsymbol{f}$$

となる．ここで，$\boldsymbol{g} = B^{-1} f$ を計算し，高速解法を用いて $V^{-1}\boldsymbol{g}$ を計算する．最後に，W^{-1} を掛け，修正量 $W^{-1} V^{-1} B^{-1} \boldsymbol{f}$ を計算する．計算量は $O(n^2)$ になる．

8 位置問題数値実験

8.1 質量が全て 1 のとき

多項式の零点問題に変換し，Duland-Kerner 法で解く方法との比較実験を行う．

モーメント問題は質量が全て 1 のとき，

$$f_k = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i^k - \mu_k = 0 \qquad (1 \le k \le n+1) \tag{12}$$

となる．

$$g(x) = \prod_{i=0}^{n}(x-\alpha_i) = x^{n+1} + b_1 x^n + \cdots + b_n x + b_{n+1}$$

モーメント $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \mu_2, \mu_{n+1})$ は $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n)$ の対称式である．$g(x)$ の係数 $\boldsymbol{b} = (b_1, b_2, \cdots, b_{n+1})$ は $\boldsymbol{\alpha}$ の基本対称式であるから，モーメント $\boldsymbol{\mu}$ は $\boldsymbol{b}$ で表すことができる．この関係を $\boldsymbol{b}$ に関して解けば $\boldsymbol{b}$ が $\boldsymbol{\mu}$ で表せる．具体的には，次の漸化式により $\boldsymbol{\mu}$ から $\boldsymbol{b}$ が計算できる．

$$b_0 = 1, \quad b_1 = 1 \tag{13}$$

$$b_{k+1} = \frac{-1}{k}\sum_{l=0}^{k-1} b_{l+1}\mu_{k-l} \qquad (1 \le k \le n+1). \tag{14}$$

代数方程式 $g(z) = 0$ を解くことにより，$\boldsymbol{\alpha}$ を求めることができる．

(13) で係数 $\boldsymbol{b}$ を計算し，$g(z) = 0$ を DK 法で解く方法と，我々の方法を比較する．DK 法は $\boldsymbol{b}$ を計算するとき，丸め誤差が生じ数値精度を劣化することが予想できる．

実験方法としては，質点の個数 n を 6〜20 まで調べる．質点を単位円内部にランダムで分布させる．質点 $\boldsymbol{\alpha}$ の数値解 $\tilde{\boldsymbol{\alpha}} \cong \boldsymbol{\alpha}$ からモーメント $\tilde{\boldsymbol{\mu}}$ を計算し．残差ノルム $||\tilde{\boldsymbol{\mu}} - \boldsymbol{\mu}||_\infty$ を比較する．各 n について 100 問の問題を作製し，DK 法と我々の高速解法で解いた．残差ノルムを高速解法と DK 法で計算し，両者の比の 2 を底とした対数をとり，100 回の平均を取る．この値が k なら我々の方法は DK 法より平均して k ビット精度が良いことになる．反復回数についても 100 回の平均を記録する．表 1 は数値実験の結果である．

表 1

n	DK 法回数	高速解法回数	$\log_2$(残差ノルム比)
6	11.44	19.23	2.29269
7	12.8	21.62	3.07701
8	12.8	21.62	3.83554
9	12.51	23.56	2.5407
10	12.85	26.07	2.77094
11	13.96	29.65	2.90541
12	14.38	32.77	3.32805
13	14.66	35.49	3.56813
14	15.19	40.04	3.58353
15	15.76	44.54	3.94125
16	16.38	47.71	4.07474
17	17.09	58.18	3.80152
18	18.03	60.28	3.91039
19	17.96	72.73	3.7197
20	18.97	88.06	3.85451

数値実験の結果より高速解法は DK 法より n 個の点の位置を求めるのに約 2 倍の回数かかってしまうが，精度としては高速解法の方が良いことが分かった．

8.2 質量が複素数のとき

この問題には Duland-Kerner 法は使えないので，我々の方法だけで解く．

例 1

質量を $\boldsymbol{w} = (2, 2, 3, 4, 5)$ とし，位置問題を解いた．結果 $||\tilde{\boldsymbol{\mu}} - \boldsymbol{\mu}||_\infty = 3.1 \times 10^{-16}$ となった．

モーメント $\boldsymbol{\mu}$ は一致したが，位置 $\boldsymbol{\alpha}$ は一致しなかった．この問題は非線形であるために，解が複数あることが分かった．

例 2 質量を $\boldsymbol{w} = (0.000725524 + 0.000314066i, 0.970562 - 0.192944i, 0.0849775 - 0.182005i, 0.0882467 - 0.0164313i, -0.174822 - 0.149318i)$ とし，位置問題を解いた．

結果 $||\tilde{\boldsymbol{\mu}} - \boldsymbol{\mu}||_\infty = 5.5 \times 10^{-14}$ となった．例 1 と同じく，モーメント $\boldsymbol{\mu}$ は一致したが，位置 $\boldsymbol{\alpha}$ は一致しなかった．この問題は非線形であるために，解が複数あることが分かった．

9 位置質量問題定義

モーメント問題の位置質量問題では，

モーメント方程式

$$f_k = \sum w_i \alpha_i^k - \mu_k = 0 \qquad (0 \le k \le 2n+1) \tag{15}$$

から，質点点 $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_0, \alpha_1, \ldots, \alpha_n)$ と，$\boldsymbol{w} = (w_0, w_1, \ldots, w_n)$ を求める．$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_{2n+1}, x_{2n+2}) = (w_0, \alpha_0, w_1, \alpha_1, \cdots, w_n, \alpha_n)$ と定義する．(14) は非

線形方程式であるので Newton 法を用いて解く．Newton 法 (1 回反復）は

$$\boldsymbol{x}_{new} = x - J^{-1}\boldsymbol{f}$$

である．ここで $\boldsymbol{f} = (f_0, f_1, \cdots, f_{2n+1})$ である．

Jacobian 行列

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_0}{\partial x_1} & \frac{\partial f_0}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_0}{\partial x_{2n+1}} & \frac{\partial f_1}{\partial x_{2n+2}} \\ \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_{2n+1}} & \frac{\partial f_2}{\partial x_{2n+2}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f_{2n+1}}{\partial x_1} & \frac{\partial f_{2n+1}}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_{2n+1}}{\partial x_{2n+1}} & \frac{\partial f_{2n+1}}{\partial x_{2n+2}} \end{bmatrix}$$

を計算すると，

$$J = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \alpha_0 & w_0 & \cdots & w_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_0^{2n+1} & (2n+1)w_0\alpha_0^{2n} & \cdots & (2n+1)w_n\alpha_n^{2n} \end{bmatrix}$$

ここで，

$$Q = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 1 & 0 \\ \alpha_0 & 1 & \cdots & \alpha_n & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \alpha_0^{2n+1} & (2n+1)\alpha_0^{2n} & \cdots & \alpha_n^{2n+1} & (2n+1)\alpha_n^{2n} \end{bmatrix}$$

$$W = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & w_0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & w_n \end{bmatrix}$$

とすると，$J = QW$ と表すことができる．Q は単項式基底による Helmite 補間の一般化 Vandermonde 行列である．

$$\boldsymbol{x}_{new} = x - J^{-1}\boldsymbol{f}$$

は，

$$\boldsymbol{x}_{new} = x - W^{-1}Q^{-1}\boldsymbol{f}$$

となり，高速解法を用いて $Q^{-1}\boldsymbol{f}$ を計算し，W^{-1} を掛ける，$W^{-1}Q^{-1}\boldsymbol{f}$ を計算する．計算量 $\boldsymbol{O}(n^2)$ で計算である．

実験方法としては，$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_{2n+1}, x_{2n+2}) = (w_0, \alpha_0, w_1, \alpha_1, \cdots, w_n, \alpha_n)$ の $n = 2, 4, 8$ を調べる．質点と質量を単位円内部にランダムで分布させる．$\tilde{\boldsymbol{x}}$ から $\tilde{\boldsymbol{\mu}}$ を計算し，$||\tilde{\boldsymbol{\mu}} - \boldsymbol{\mu}||_\infty$ が 10^{-10} になるまで反復を繰り返し最後にもう一度反復した．100 問解き，平均反復回数を求める．また，$\log_{10}||\tilde{\boldsymbol{\mu}} - \boldsymbol{\mu}||_\infty$ を計算し，同じく 100 問解き平均値を記録する．表 2 は数値結果である．

表 2

n	平均反復回数	$\log_{10}||\tilde{\boldsymbol{\mu}} - \boldsymbol{\mu}||$ の平均値
2	25.25	-16.3668
4	67.68	-15.9306
8	193.05	-15.4468

10　おわりに

本研究では 3 種のモーメント問題の高速解法について研究した．坂元 [1] の質量問題の高速解法を Highan の理論 [2] で一般化した．

Higham のアルゴリズムを Newton 法の修正量の計算に応用して，非線形問題である位置問題，位置質量問題についての高速解法を得た．

均一質量の位置問題の数値実験では，位置問題を 1 変数代数方程式に変換し，それを Duland-Kerner 法で解く方法と比較を行った．我々の高速解法は DK 法より良い精度を期待できることが分かった．

任意質量の位置問題は，複数の解をもつことが発見された．それに対し，位置質量問題では複数解をもつ問題は発見できなかった．位置質量問題の解は 1 意であると思われるが，未証明である．

この研究では，Vandermonde 方程式をモーメント問題の解法に用い，数値実験結果は良好であった．従来 Vandelmonde 方程式は条件数が非常に大きくなる可能性があるため，応用が避けられてきた．Vandermonde 方程式の数値的安定性に関する新しい観点の理論が求められる．

質量が任意の位置問題は複数解を持つことがわかった．これは，位置を特定するという本来の目的からは不十分な結果である．位置問題の解に関する詳しい検討が必要である．

参考文献

[1] 坂元悠介：モーメント問題の高速解法，南山大学情報システム数理学科 2014 年度卒業論文 (2015)

[2] J.Higham：Accurcy and stability of Numerical Algorithms，siam(2002).

[3] 上岡航平：複素周回積分による解析関数の因数分解，南山大学数理情報システム数理学科 2012 年度卒業論文 (2013).

[4] 村井智：複素関数による多項式の因数分解，南山大学数理情報システム数理学科 2011 年度卒業論文 (2012).

[5] 山田ひかる：複素周回積分による非線形方程式の解法，南山大学数理情報システム数理学科 2012 年度卒業論文 (2013).