Jacobi 多項式のゼロ点を求める変わった数値計算手法

adhara*

2018 年 12 月 22 日

目次

* Twitter @adhara_mathphys

1　はじめに

この文書において最も伝えたいことは「ある種の多項式のゼロ点は相互作用する質点系の平衡状態として与えられる」というものである。本文書ではその例として Jacobi の多項式のゼロ点に関する変わった数値計算手法を紹介する。

2　Jacobi の多項式

Jacobi の多項式は Gauss の超幾何関数 ${}_2F_1$ を用いて

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(z) = \frac{(\alpha+1)_n}{n!}\,{}_2F_1\left(-n, 1+\alpha+\beta+n; \alpha+1; \frac{1}{2}(1-z)\right) \tag{1}$$

のように定義される。

Gauss の超幾何関数において

$${}_2F_1(-n,b;c;z) = \sum_{m=0}^{n} (-1)^m \begin{pmatrix} n \\ m \end{pmatrix} \frac{(b)_m}{(c)_m} z^m \tag{2}$$

が成立するので、Jacobi の多項式は

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(z) = \frac{\Gamma(\alpha+n+1)}{n!\Gamma(\alpha+\beta+n+1)} \sum_{m=0}^{n} \begin{pmatrix} n \\ m \end{pmatrix} \frac{\Gamma(\alpha+\beta+n+m+1)}{\Gamma(\alpha+m+1)} \left(\frac{z-1}{2}\right)^m \tag{3}$$

と書ける。ただし、Pochhammer 記号とガンマ関数の間の関係式である

$$(x)_n = \frac{\Gamma(x+1)}{\Gamma(x-n+1)}$$

を用いている。

Jacobi の多項式が満たす微分方程式は

$$\left(1-x^2\right) y'' + (\beta-\alpha-(\alpha+\beta+2)x)y' + n(n+\alpha+\beta+1)y = 0 \tag{4}$$

となる。

Jacobi の多項式においては直交性が成立する。すなわち、

$$\int_{-1}^{1} (1-x)^\alpha (1+x)^\beta P_m^{(\alpha,\beta)}(x) P_n^{(\alpha,\beta)}(x) dx = \frac{2^{\alpha+\beta+1}}{2n+\alpha+\beta+1} \frac{\Gamma(n+\alpha+1)\Gamma(n+\beta+1)}{\Gamma(n+\alpha+\beta+1)n!} \delta_{nm}, \quad \alpha,\beta > -1 \tag{5}$$

となる。

Jacobi の微分方程式を含む超幾何微分方程式はリーマン面上に三つの確定特異点を含む Fuchs 型二階常微分方程式である。特に上記の Jacobi の微分方程式においては $x = \pm 1, \infty$ の三点が確定特異点となっている。$x = \infty$ が確定特異点になるとは、微分方程式において $t = x^{-1}$ の変数変換を行った時に $t = 0$ が確定特異点になることを意味する。

確定特異点を見やすい形に微分方程式を変形すると、

$$y'' + \left(\frac{\alpha+1}{x-1} + \frac{\beta+1}{x+1}\right) y' - \frac{n(n+\alpha+\beta+1)}{(x-1)(x+1)} y = 0 \tag{6}$$

となる。

Jacobi 多項式に含まれる有用な多項式として Gegenbauer 多項式、Legendre 多項式、Chebyshev 多項式などがある。後者二つは Gegenbauer 多項式のサブセットでもある。

n 次の指数 α の Gegenbauer 多項式は

$$C_n^{(\alpha)}(x) = \frac{(2\alpha)_n}{\left(\alpha+\frac{1}{2}\right)_n} P_n^{(\alpha-1/2,\alpha-1/2)}(x) \tag{7}$$

となる。

そのサブセットである n 次の Legendre 多項式は

$$P_n(x) = P_n^{(0,0)}(x) = C^{\left(\frac{1}{2}\right)}(x) \tag{8}$$

であり、n 次の第一種 Chebyshev 多項式と第二種 Chebyshev 多項式はそれぞれ

$$T_n(x) = \frac{n}{2} \lim_{q\to 0} \frac{1}{q} C_n^{(q)}(x) \text{ if } n \geq 1 \tag{9}$$

$$U_n(x) = \frac{n+1}{\left(n+\frac{1}{2}\right)} P_n^{\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)}(x) = C_n^{(1)}(x) \tag{10}$$

となる。

3　考える問題と紹介したい数値計算法

この文書で取り上げる問題は、Jacobi 多項式のうち $\alpha, \beta > -1$ についてのゼロ点を求める問題である。パラメータ α, β を制限する理由は後にわかる。Legendre 多項式のゼロ点を求める問題はこれに含まれる。Legendre 多項式のゼロ点は Gauss–Legendre の求積法や微分方程式の数値陰解法の一つ Runge–Kutta–Gauss-Legendre 法などで用いられる

これを数値計算により求めるためには、多項式の具体形を知っているので Newton–Raphson 法などを使えば求めることができる。

しかし、この文書で紹介したいものは数理物理的背景のあるゼロ点の少し変わった数値計算法である。すなわち、相互作用する質点系の平衡状態として表されることを利用した数値計算手法を紹介する。

一点断りを入れると、この手法は数値計算手法として効率が良いものではなく面白いので紹介している。

4 Heine–Stieltjes 理論

この章では $\alpha, \beta > -1$ の Jacobi の微分方程式を拡張した、ある多項式 P を解にもつ次の微分方程式

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \sum_{i=1}^{n+1} \frac{\lambda_i}{\rho - e_i}\frac{d}{d\rho} - \frac{V(\rho)}{\prod_{i=1}^{n+1}(\rho - e_i)}\right] P(\rho) = 0 \tag{11}$$

を考える。ただし、

$$\lambda_i > 0,\ e_1 > e_2 > \cdots > e_{n+1} \tag{12}$$

であり、$V(\rho)$ は高々次数 $n-1$ の多項式であるとする。微分方程式が多項式解をもつためような V は実際には限られるが、そのような V を van Vleck 多項式あるいはアクセサリー多項式、対応する多項式解 P を Heine–Stieltjes 多項式と呼ぶ。

この微分方程式についていくつか説明が必要である。まず、これは Fuchs 型の二階線形微分方程式である。したがってそれが持つ特異点は全て確定特異点であり、$x = e_1, e_2, \cdots, e_{n+1}, \infty$ の $n+2$ 個存在する。$n = 1$ の時は Gauss の超幾何微分方程式になり Jacobi の微分方程式の場合はそれに含まれる。それぞれの確定特異点について特性指数が存在し、$x = e_i$ については $0, 1 - \lambda_i$.、$x = \infty$ については $-m, m - 1 + \sum_{i=1}^{n+1} \lambda_i$ となる。これら $2(n+2)$ 個の特性指数の和は n となるが、これは Fuchs の関係式と呼ばれるものである。

証明なしにいくつか成り立つ事柄を列挙する。詳しくは証明や解説は Szegö の教科書 [1] を参照のこと。

- 多項式解 P の根は全て実でありしかも重根とならない。
- 全ての根は開区間 (e_1, e_{n+1}) に存在する。
- 微分方程式の確定特異点 $e_1, e_2, \cdots, e_{n+1}$ は P の根とならない。
- van Vleck 多項式 V を同じくする多項式解 P, Q があれば、P と Q は線形従属である。
- 二つの van Vleck 多項式 $V = V_1, V_2$ について同一の多項式解 P が成立する時、$V = W$ である。
- van Vleck 多項式 V の次数は $n-1$ であり、最高字数の係数は $m(m - 1 + \sum_{i=1}^{n+1} \lambda_i)$ である。
- 各開区間 (e_{i+1}, e_i) に m 個の区別できない点をばらまく場合の数すなわち ${}_{m+n-1}C_{n-1}$ 個の線型独立な m 次の多項式解が存在する。このばらまき方は各区間に存在する根の数に対応し、各ばらまき方が一つの解を表す。先の主張によりそれぞれの解に対応する van Vleck 多項式は全て異なる。
- ある m 次多項式解 P の根を $\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_m$ とする。この時、m 変数関数 $W(x_1, x_2, \cdots x_m) = \prod_{l=1}^{m} \left(\prod_{i=1}^{n+1} |x_l - e_i|^{\frac{\lambda_i}{2}}\right) \prod_{1 \leq s < t \leq m} |x_s - x_t|$ を定義すると各 $l = 1, 2, \cdots, m$ に対して $\frac{\partial W}{\partial x_l}(\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_m) = 0$ が成立する。逆に $\frac{\partial W}{\partial x_l} = 0$ の一つの解は ${}_{m+n-1}C_{n-1}$ 個ある m 次多項式のうちの一つの多項式の m 個の根を与える。したがって $\frac{\partial W}{\partial x_l} = 0$ の解は ${}_{m+n-1}C_{n-1}$ 個あるということである。

以上より、

$$W(x_1, x_2, \cdots x_m) = \prod_{l=1}^{m} \left(\prod_{i=1}^{n+1} |x_l - e_i|^{\frac{\lambda_i}{2}} \right) \prod_{1 \le s < t \le m} |x_s - x_t|. \tag{13}$$

に対して、

$$\frac{\partial W}{\partial x_l}(\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_m) = 0 \quad (1 \le l \le m) \tag{14}$$

の解を求めれば各解はある多項式解の根を与えるということである。さらに、解の付近においては $W > 0$ であるので、

$$\frac{\partial \mathrm{ln} W}{\partial x_l}(\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_m) = 0 \quad (1 \le l \le m) \tag{15}$$

に置き換えても良い。ここで、

$$\mathrm{ln} W = \sum_{l=1}^{m} \left(\sum_{i=1}^{n+1} \frac{\lambda_i}{2} \mathrm{ln}|x_l - e_i| \right) + \sum_{1 \le s < t \le m} \mathrm{ln}|x_s - x_t|. \tag{16}$$

であるから、結局

$$\sum_{i=1}^{n+1} \frac{\lambda_i}{2} \frac{1}{x_l - e_i} + \sum_{i=1, i \ne l}^{m} \frac{1}{x_l - x_i} = 0 \quad (1 \le l \le m) \tag{17}$$

という式に帰着する。最後の式は Niven の方程式あるいは Niven の条件等の呼ばれ方をする。

最後の式には物理的な解釈がある。すなわち、左辺は距離の逆数に比例する力を及ぼしあう点電荷系においてある点 x_l が感じる力を表すので、この式はそのような点電荷系における平衡状態を与える式と解釈できる。逆数に比例する力を与えることができるのは、二次元の電磁気学におけるクーロン力に他ならない。

5　Heine–Stieltjes を利用して Jacobi 多項式のゼロ点を求める。

Jacobi 多項式の場合は $e_1 = 1, e_2 = -1$ であり、ゼロ点は (e_1, e_2) の中にあるケースしか存在しない。したがって独立な m 次多項式解の数は一つ（この区間に m 個の区別できない点をばらまくやり方は一つ）である。そして、考えるべき方程式は

$$\frac{a+1}{2} \frac{1}{x_l - 1} + \frac{b+1}{2} \frac{1}{x_l + 1} + \sum_{i=1, i \ne l}^{m} \frac{1}{x_l - x_i} = 0 \quad (1 \le l \le m) \tag{18}$$

となる。

これを数値的に求めるためには例えば

$$\mathrm{ln} W = \sum_{l=1}^{m} \left(\frac{a+1}{2} \mathrm{ln}|x_l - 1| + \frac{b+1}{2} \mathrm{ln}|x_l + 1| \right) + \sum_{1 \le s < t \le m} \mathrm{ln}|x_s - x_t|. \tag{19}$$

の最小化問題に帰着させれば良い。

6 裏話

微分方程式の多項式解のゼロ点を求めるという体裁で電荷系における平衡状態を求める数値解法を紹介したが、現実はこの解法の効率は悪い。実は話は逆で電荷系における平衡状態を微分方程式の多項式解を求める問題に帰着させて微分方程式の方を解くという使い方がよく、実際にそのような論文 [2] が出ている。

参考文献

[1] Szegö, "Orthogonal polynomials", New York, 1939.

[2] Guan, Xin, et al. "Numerical algorithm for the standard pairing problem based on the Heine–Stieltjes correspondence and the polynomial approach." Computer Physics Communications 185.10 (2014): 2714-2723.