

近接根クラスターの代数的分離法と最小根間距離*

佐々木 建昭

筑波大学 数学系[†]

TATEAKI SASAKI

INSTITUTE OF MATHEMATICS, UNIVERSITY OF TSUKUBA

加古 富志雄

奈良女子大学 情報科学科[‡]

FUJIO KAKO

DEPT. INF. COMP. SCI., NARA WOMEN'S UNIVERSITY

Abstract

本論では、与えられた $\mathbb{C}$ 上の 1 変数多項式が互いに十分離れた近接根クラスターを持つとの仮定の下、近接根クラスターを分離する代数的方法を探索し、近接根を考慮して最小根間距離の下限公式を追求する。用いる方法は非常に斬新で強力なものである：原点を近接根クラスターの中心近傍に移動すれば、クラスターの外の根を集团的に扱うことができ、問題は非常に単純化される。この方法を利用して、非常に簡単かつ有効なクラスター分離法を考案し、 $\mathbb{C}$ 上の多項式に対する最小根間距離の実際的な下界公式を導出する。

1 はじめに

1 変数多項式の求根は非常に古い問題であるが、代数的方法が提案されたのは 1990 年代である。桜井・杉浦・鳥居 [SST92] は Hermite 補間に基づく方法を提案し、Pan [Pan95,96,01] は Graeffe 変換を利用した方法を考案し、彼の方法の計算量が非常に小さいことを示した。これらの方法はいずれも、与多項式を次数がほぼ半分の二つの多項式の積に数値的に分解し、これを繰り返すことで最終的に 1 次因子にまで分解するものである。多くの多項式に対して非常に有効そうに見えるが、与多項式が近接根を持つ場合には算法が不安定になるのが実情である。本論文では、互いに近接した根のみを含むクラスターを任意の精度で分離することを目的とする。こうすることで近接根も安定に計算できるようになる。3 章で詳述するが、うまく規格化された多項式剰余列 (PRS) を用いれば、近接根クラスターの存在、大きさ、および位置を知ることができる。これらの情報を基に、3 章では非常に簡単かつ有効な近接根クラスターの分離法を提案する。

計算機代数では、理論的上界あるいは下界が実際の値より途方もなく異なるものがいくつかある。最小根間距離は正にそのような量である。 $A(x)$ は $\mathbb{C}$ 上あるいは $\mathbb{Z}$ 上の無平方な 1 変数多項式とし、その根を $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ ($\alpha_i \neq \alpha_j$ ($\forall i \neq j$)) とする。 $A(x)$ の最小根間距離 $\text{Sep}(A)$ は、 $\text{Sep}(A) = \min\{|\alpha_i - \alpha_j| \mid 1 \leq i < j \leq n\}$ と定義される。[Mig92] に見られるように、 $\mathbb{Z}$ 上の多項式に対して $\text{Sep}(A)$ の多くの下界公式が提出されている。Collins と Horowitz [CH74] は公式 $\text{Sep}(A) > \frac{1}{2} e^{-n/2} n^{-3n/2} \|A\|_\infty^{-n}$ ($\|A\|_p$ は p ノルム) を導出し、Mignotte [Mig92] はよりよい公式 $\text{Sep}(A) > n^{-(n+2)/2} D^{1/2} \|A\|_2^{-(n-1)}$ (D は $A(x)$ の判別式) を得た。しかしながら、これらの下界は実際の値より桁違いに小さい。実際、Collins [Col01] は 1 変数多項式の根を

*Work supported in part by Japanese Ministry of Education, Science and Culture under Grants 15300002.

[†]sasaki@math.tsukuba.ac.jp

[‡]kako@ics.nara-wu.ac.jp

組織的に計算し、経験則として $\text{Sep}(A) > n^{-n/4} \|A\|_{\infty}^{-1/2}$ を得ている。従来、最小根間距離公式の導出では近接根は考慮されていない。最小根間距離とは最も近接した2根間の距離であるから、近接根の考慮は絶対的に必要である。4章では、近接根を考慮して最小根間距離の下限公式を導出する。

上記二つの課題に対する著者らの攻略法は、[TS00] で考案され [IS04] 他で使われたもので、非常に斬新で強力なものである。原点を近接根クラスタの中心近傍に移動すると、移動後の多項式の係数は特徴的な振舞いをする。この振舞いを利用すれば、クラスタの外にある根全体を集团的に扱うことができ、問題は非常に簡単化される。そして、従来に比べて圧倒的に“正確な”不等式を得ることができる。

2 近接根クラスタに関する間隙定理

本章では、4章で必要となる定理 [TS00, ST02] を復習し、近接根が2個の場合に特化した定理を与える。定理はいずれも、近接根クラスタとそうでない根の間隙の下界を与えてくれる。なお、紙面の都合上、証明は省略するので、英文論文 [SK05] を参照されたい。4章で必要な定理は次である。

定理 1 (Sasaki and Terui) $\bar{A}(x)$ は次式で表される $\mathbb{C}$ 上の多項式とする。

$$\bar{A}(x) = \bar{a}_n x^n + \cdots + \bar{a}_{m+1} x^{m+1} + 1 \cdot x^m + \bar{e}_{m-1} x^{m-1} + \cdots + \bar{e}_0, \quad (1)$$

$$\begin{cases} \max\{|\bar{a}_n|, \dots, |\bar{a}_{m+1}|\} = 1, \\ \bar{e} \stackrel{\text{def}}{=} \max\{|\bar{e}_{m-1}|^{1/1}, |\bar{e}_{m-2}|^{1/2}, \dots, |\bar{e}_0|^{1/m}\} \ll 1. \end{cases} \quad (2)$$

$0 < \bar{e} < 1/9$ ならば $\bar{A}(x)$ は半径 $\bar{R}_{\text{in}}$ の円盤 D_{in} の内部に m 個の微小根を持ち、半径 $\bar{R}_{\text{out}}$ の円盤 D_{out} の外部に他の $n-m$ 個の根を持つ。ただし、円盤 D_{in} と D_{out} の中心は原点で、半径は次式である。

$$\bar{R}_{\text{in(out)}} = \frac{(1 + 3\bar{e}) - (+)\sqrt{(1 + 3\bar{e})^2 - 16\bar{e}}}{4}. \quad (3)$$

系 1 原点近傍の近接根クラスタ中の m 根はいずれも、 $\bar{A}(x)$ の他の $n-m$ 根から少なくとも $\bar{R}_{\text{out}} - \bar{R}_{\text{in}} = \frac{1}{2}\sqrt{(1+3\bar{e})^2 - 16\bar{e}}$ 以上離れている。 $\square$

稲葉・佐々木 [IS04] は上記定理を $m=1$ に特化した定理を得たが、本論では $m=2$ の場合を考察する。すなわち、原点近傍には2個の近接根を含むクラスタがあるとする。まず、原点が2近接根の一方に極めて近い場合、すなわち次の形に正規化された多項式 $\bar{A}_2(x)$ を考える。

$$\begin{cases} \bar{A}_2(x) = \bar{a}_n d^{n-2} x^n + \cdots + \bar{a}_3 d x^3 + \bar{a}_2 x^2 + x + \bar{e}_0, \\ 0 < d \ll 1, \quad 0 < |\bar{e}_0| \ll 1, \\ \max\{|\bar{a}_n|, \dots, |\bar{a}_3|\} = |\bar{a}_2| = 1. \end{cases} \quad (4)$$

定理 2 簡単のため、 $\hat{e} = |\bar{e}_0|$ とおく。 $\hat{e} < 1/[(2+d) + 2\sqrt{1+d}]$ ならば、 $\bar{A}_2(x)$ は半径 $\hat{R}_{\text{in}}$ の円盤 D_{in} の内部に一つの根を持ち、半径 $\hat{R}_{\text{out}}$ の円盤 D_{out} の外部に他の $n-1$ 根を持つ。ここで、二つの円盤の中心は原点で、半径は次式である。

$$\hat{R}_{\text{in(out)}} = \frac{(1 + d\hat{e}) - (+)\sqrt{(1 + d\hat{e})^2 - 4(1+d)\hat{e}}}{2(1+d)}. \quad (5)$$

系 2 原点近傍の最小根 $\hat{\gamma}$ は、他の $n-1$ 根から $\sqrt{(1+d\hat{e})^2 - 4(1+d)\hat{e}}/(1+d)$ 以上離れている。 $\square$

次に、原点が二つの近接根の中心近傍にある場合、すなわち次の形に正規化された多項式 $\bar{A}_2(x)$ を考える。

$$\begin{cases} \bar{A}_2(x) = \bar{a}_n x^n + \cdots + \bar{a}_3 x^3 + x^2 + \bar{e}_1 x + \bar{e}_0, & |\bar{e}_0| \neq 0, \\ \max\{|\bar{a}_n|, \dots, |\bar{a}_3|\} = 1, & \bar{e} \stackrel{\text{def}}{=} \max\{|\bar{e}_1|, |\bar{e}_0|^{1/2}\} \ll 1. \end{cases} \quad (6)$$

定理 3 多項式 $P_2(r) = 2r^3 - (1 + |\bar{e}_1|)r^2 + (|\bar{e}_1| - |\bar{e}_0|)r + |\bar{e}_0|$ が 2 実根 $\bar{R}_{\text{in}}, \bar{R}_{\text{out}}$ ($\bar{R}_{\text{in}} < \bar{R}_{\text{out}}$) を持つなら、 $\bar{A}_2(x)$ は半径 $\bar{R}_{\text{in}}$ の円盤 D_{in} の内部に 2 根を持ち、半径 $\bar{R}_{\text{out}}$ の円盤 D_{out} の外部に他の $n-2$ 根を持つ。ここで、二つの円盤の中心は原点であり、 $P_2(r)$ が 2 実根を持つ条件は次の 2 条件が同時に成立することである。

$$\begin{cases} \text{Condition 1: } |\bar{e}_1| < |\bar{e}_0|, \\ \text{Condition 2: } R < 0, \end{cases} \quad (7)$$

$$R = |\bar{e}_1|^4 - |\bar{e}_1|^3(6 - 2|\bar{e}_0|) + |\bar{e}_1|^2(1 - 4|\bar{e}_0| + |\bar{e}_0|^2) - |\bar{e}_1|(26|\bar{e}_0| - 14|\bar{e}_0|^2) + (4|\bar{e}_0| - 71|\bar{e}_0|^2 + 8|\bar{e}_1|^3). \quad \square$$

3 近接根クラスタの分離

本章では、多項式 A を B で割った商と剰余をそれぞれ $\text{quo}(A, B)$, $\text{rem}(A, B)$ と表し、 A の主係数を $\text{lc}(A)$ と表す。また、多項式 P の無限大ノルム（係数の絶対値の最大値）を $\|P\|$ と表す。

多項式 $A(x)$ はモニック ($\text{lc}(A) = 1$) で、次のように規格化されているとする。

$$a_n = \max\{|a_{n-1}|, \dots, |a_0|\} = 1. \quad (8)$$

このとき、 $A(x)$ の任意の根 α は $|\alpha| \leq 2$ を満たす。したがって、 $A(x)$ の 2 根 α_i と α_j が $|\alpha_i - \alpha_j| \ll 1/n$ を満たすとき、 α_i と α_j は近接度 $|\alpha_i - \alpha_j|$ の近接根という。以下では、 $A(x)$ の近接根は異なるサイズ $O(\delta_1), \dots, O(\delta_\tau)$ ($1/n \gg \delta_1 \gg \dots \gg \delta_\tau$) のクラスタを成し (τ は 1 でもよい)、クラスタは互いに十分に離れているものとする。近接度 $O(\delta_i)$ 以下の近接根の個数を m_i とし、近接度 $O(\delta_i)$ の近接根は ℓ_i 個のクラスタに分散しているものとする ($i = 1, \dots, \tau$)。大きなクラスタは (複数の) 小クラスタを含んでもよい。クラスタ中心とは、そのクラスタ中の近接根の平均であるとする。

3.1 規格 PRS (Polynomial Remainder Sequence)

$P_1 = A(x)$, $P_2 = \frac{1}{n} dA/dx$, $S_1 = T_2 = 1$, $S_2 = T_1 = 0$ とおき、剰余列 $(P_1, P_2, P_3, P_4, \dots)$ と余因子列 $(S_1, S_2, S_3, S_4, \dots)$, $(T_1, T_2, T_3, T_4, \dots)$ を次の算式で生成する (w_j は数である)。

$$\begin{cases} q_j &:= \text{quo}(P_{j-1}, P_j), \\ P_{j+1} &:= (P_{j-1} - q_j P_j)/w_j, \\ S_{j+1} &:= (S_{j-1} - q_j S_j)/w_j, \\ T_{j+1} &:= (T_{j-1} - q_j T_j)/w_j, \end{cases} \quad (j = 2, 3, \dots). \quad (9)$$

次式を満たすように w_j を選ぶとき、得られる剰余列を規格 PRS と呼ぶことにする。

$$\max\{\text{lc}(S_{j+1}), \text{lc}(T_{j+1})\} = 1 \quad (j = 2, 3, \dots). \quad (10)$$

剰余列の要素のインデックス $k_1, k_2, \dots, k_\tau$ を次のように定める。

$$\deg(P_{k_i}) = m_i - \ell_i \quad (i = 1, 2, \dots, \tau). \quad (11)$$

$\deg(P_{k_i})$ は ℓ_i 個のクラスタに分散する近接度 $O(\delta_i)$ 以下の dA/dx の近接根の個数に等しく、 P_{k_i} は $A(x)$ と dA/dx の許容度 $O(\delta_i)$ の近似共通因子である。

規格 PRS は次の特徴的性質を持つ；詳しくは [SS89], [Sas03] を参照されたい。

- 1) $j \leq k_1$ なるインデックス j に対して $\|P_j\| = O(\delta_1^0)$ となる (すなわち、剰余が A と dA/dx の近似 GCD になるまでは、 $\|P_j\|$ が大きく減少することはない)。

- 2) 各インデックス $i = 1, \dots, \tau$ に対して $\|P_{k_i+1}\|/\|P_{k_i}\| = O(\delta_i^2)$ となる (すなわち、 P_{k_i} は A と dA/dx の許容度 $O(\delta_i^2)$ の近似 GCD である)。
- 3) $A(x)$ のサイズ $O(\delta_1)$ のクラスタが1個のとき、PRS は単クラスタ型であるという。単クラスタ型 PRS は、 $j > k_1$ なる j に対して (より小さなクラスタが現れるまでは) $\|P_{k_1+j}\| = O(\delta_1^{2j})$ となる。
- 4) $A(x)$ のサイズ $O(\delta_1)$ のクラスタが2個以上のとき、PRS は複クラスタ型であるという。複クラスタ型 PRS は、 $1 \leq j < \ell_1$ なる j に対しては $\|P_{k_1+j+1}\|/\|P_{k_1+1}\| = O(\delta_1^0)$ 、 $\|P_{k_1+\ell_1+1}\|/\|P_{k_1+1}\| = O(\delta_1^2)$ 、等となる。すなわち、相続く ℓ 回の剰余計算で ℓ 個のクラスタから1個ずつ近接根が剥ぎ取られるが、 $\ell-1$ 回目までの剰余計算では剰余のノルムは大きくは減少せず、 ℓ 回目で大きく減少する。PRS は、近接度 $O(\delta_1)$ の近接根が全て剥ぎ取られたあとに単クラスタ型になることもある。

PRS が単クラスタ型であるか複クラスタ型であるかは、規格 PRS の振舞いから明確に区別できる。

3.2 クラスタの位置の計算

まず、単クラスタ型 PRS を考察する。 $A(x)$ の PRS は単クラスタ型である (すなわち $\ell_1 = 1$) と仮定し、簡単のため $\delta_1 = \delta$, $k_1 = k$, $m_1 = m$ とおく。クラスタ中の近接根を $\alpha_1, \dots, \alpha_m$ とし、クラスタ中心を $\alpha_c = (\alpha_1 + \dots + \alpha_m)/m$ とする。 $P_k(x)$ を下記のように表し、 α'_c を次式で計算する。

$$\begin{cases} P_k(x) = p_{m-1}x^{m-1} + p_{m-2}x^{m-2} + \dots + p_0, \\ \alpha'_c \stackrel{\text{def}}{=} \frac{-1}{m-1} p_{m-2}/p_{m-1}. \end{cases} \quad (12)$$

次節で示すように $|\alpha'_c - \alpha_c| = O(\delta^2)$ であるので、 α'_c は α_c に極めて近い近似中心である。

次に、複クラスタ型 PRS を考察する。 $A(x)$ は近接度 $O(\delta)$ の ℓ 個 ($\ell > 1$) の近接根クラスタを持つと仮定する。すると、 $A(x)$ は次の形をしている；下記で、 α'_i は i 番目のクラスタの近似中心であり、 $\tilde{A}(x)$ は近接根以外の因子を表し、 $C(x)$ はより小さな近接根クラスタ因子を表す。

$$A(x) = \tilde{A}(x) (x - \alpha'_1)^{\mu_1} \dots (x - \alpha'_\ell)^{\mu_\ell} C(x) + O(\delta^2), \quad \mu_1 \geq \dots \geq \mu_\ell. \quad (13)$$

以下に述べる方法は本質的に [SN89] で提案された近似無平方分解の算法と同じである。 $P^{(0)} = A(x)$ とおき、 $i=1 \Rightarrow 2 \Rightarrow \dots \Rightarrow \mu_1$ の順に μ_1 個の規格剰余列を次のように生成する：

$$\begin{cases} (P_1^{(i)} = P^{(i-1)}, P_2^{(i)} = \frac{1}{\deg(P^{(i-1)})} dP^{(i-1)}/dx, \dots, P_{k_i}^{(i)} \stackrel{\text{def}}{=} P^{(i)}, P_{\text{last}}^{(i)}), \\ \|P_j^{(i)}\| = O(\delta^0) \ (j \leq k_i), \quad \|P_{\text{last}}^{(i)}\| \leq O(\delta^2). \end{cases} \quad (14)$$

$P^{(1)}, P^{(2)}, \dots$ がノルム $\|P_{\text{last}}^{(1)}\|, \|P_{\text{last}}^{(2)}\|, \dots$ の減少で決まることに注意。 $i < \mu_\ell$ なるインデックス i に対しては $P^{(i)} \propto (x - \alpha'_1)^{\mu_1-i} (x - \alpha'_\ell)^{\mu_\ell-i} C(x) + O(\delta^2)$ となり、 $\mu_\ell \leq i \leq \mu_1$ なるインデックス i に対しては $P^{(i)} \propto (x - \alpha'_1)^{\mu_1-i} (x - \alpha'_r)^{\mu_r-i} C(x) + O(\delta^2)$ ($1 < r < \ell$) となる。したがって、 $P^{(i-1)}$ と $P^{(i)}$ の商を $i = \mu_1, \mu_1-1, \dots$ に対して順に計算すれば、 $(x - \alpha'_1)^{\mu_1} \dots (x - \alpha'_\ell)^{\mu_\ell}$ に含まれる無平方因子を分離できる。たとえば、 $\mu_1 = \dots = \mu_r > \mu_{r+1} = \dots = \mu_\ell$ の場合には、次のような多項式を得る。

$$\begin{aligned} P^{(\mu_\ell-1)} &\simeq \text{const} \times C(x) \cdot [(x - \alpha'_1) \dots (x - \alpha'_r)]^{\mu_1-\mu_\ell+1} \cdot [(x - \alpha'_{r+1}) \dots (x - \alpha'_\ell)], \\ P^{(\mu_1-1)} &\simeq \text{const} \times C(x) \cdot [(x - \alpha'_1) \dots (x - \alpha'_r)], \\ P^{(\mu_1)} &\simeq \text{const} \times C(x). \end{aligned}$$

これより、 $\text{quo}(P^{(\mu_1-1)}, P^{(\mu_1)}) \approx (x - \alpha'_1) \dots (x - \alpha'_r)$ および $\text{quo}(P^{(\mu_\ell-1)}, P^{(\mu_\ell)}) \approx (x - \alpha'_1) \dots (x - \alpha'_\ell)$ を得る。最後に、近似無平方因子 $(x - \alpha'_1) \dots (x - \alpha'_r)$ と $(x - \alpha'_{r+1}) \dots (x - \alpha'_\ell)$ の根を計算すれば、クラスタ中心の近似値 $\alpha'_1, \dots, \alpha'_\ell$ を知ることができる。

3.3 剰余列に関する基本的問題

$B(x)$ は (8) の $A(x)$ のように規格化された多項式とする。 $A(x)$ と $B(x)$ とが近接度 $O(\delta)$ の相互近接根を持つなら、 $P_1 = A(x)$, $P_2 = B(x)$ から生成される規格 PRS は一般に $\|P_{k_1+1}\| = O(\delta)$ となる。ところが、 $B(x) = \frac{1}{\deg(A)} dA/dx$ の場合には規格 PRS は一般に $\|P_{k_1+1}\| = O(\delta^2)$ となる。このことは、規格 PRS は近接根クラスタに関する非常に正確な情報を与えてくれることを意味する。しかしながら、次の基本的な問題に対して我々は現在、答えを持っていない。

問題 $A(x)$ の近接根クラスタの大きさ δ と中心 α_c の十分正確な上界を多項式剰余列から決定せよ。

δ と α_c の十分正確な先験的上界を得るのは簡単ではないが、 δ が小さければ、 δ の後天的上界を得るのは容易である。 α'_c をクラスタの近似中心として、原点を α'_c へ移動し、 $A(x+\alpha'_c)$ を次のように表す。

$$A(x+\alpha'_c) \stackrel{\text{def}}{=} A'(x) = a'_n x^n + \cdots + a'_m x^m + \cdots + a'_0. \quad (15)$$

移動後の多項式 $A'(x)$ の係数は次のような特徴を示す (証明については [Sas03] を参照されたい)。

$$|a'_{m-1}/a'_m| = O(\delta^2), \quad |a'_{m-j}/a'_m| = O(\delta^j) \quad (j = 2, 3, \dots). \quad (16)$$

$A'(x)$ の $x^{m-2}, x^{m-3}, \dots, x^0$ -項の係数は単調に減少するので、定理 1 が使えて、次の命題を得る。

命題 1 $1/d = \max\{|a'_{m+1}/a'_m|, |a'_{m+2}/a'_m|^{1/2}, |a'_n/a'_m|^{1/(n-m)}\}$ と定め、 $\bar{e} = e/d$ とおく。 $\bar{e} < 1/9$ ならば、クラスタの大きさ δ は $\delta < \bar{R}_{\text{in}} d$ と抑えられる ($\bar{R}_{\text{in}}$ は (3) で定義)。

中心 α_c の十分正確な上界評価は遥かに難しいので、本論ではオーダー評価に止める。条件 (10) で定まる規格剰余の主係数は、原点移動で不変である。そこで、原点を理論的に最も扱い易い点、すなわち近接根のクラスタ中心 α_c へ移動する。このとき、 $A(x)$ と P_k を次のように表す。

$$\begin{cases} A(x) &= a''_n (x - \alpha_c)^n + \cdots + a''_m (x - \alpha_c)^m + \cdots + a''_0, \\ P_k &= p''_{m-1} (x - \alpha_c)^{m-1} + p''_{m-2} (x - \alpha_c)^{m-2} + \cdots + p''_0. \end{cases} \quad (17)$$

命題 2 クラスタ中心 α_c と近似中心 α'_c の差は $|\alpha'_c - \alpha_c| = O(\delta^2)$ である。

証明 $\alpha'_c - \alpha_c = \frac{-1}{m-1} p''_{m-2}/p''_{m-1}$ である。 α_c はクラスタ中心であるから $a''_m = O(\delta^0)$ かつ $a''_{m-1} = O(\delta^2)$ である。[Sas03] によれば、このことから $p''_{m-1} = O(\delta^0)$ かつ $p''_{m-2} = O(\delta^2)$ が導かれる。□

3.4 近接根クラスタの分離アルゴリズム

本節では、 $C(x)$ は近接度 $\leq O(\delta)$ の m 個の近接根のみを含む因子とし、 $A(x)$ からその因子 $C(x)$ を任意の精度で分離することを考える。(分離アルゴリズムを再帰的に適用すれば、大きさ $O(\delta_i)$ の任意の近接根クラスタを分離できる)。

我々は既にクラスタの近似中心 α'_c を知っているので、原点を α'_c に移動し、(15) の $A'(x) = A(x+\alpha'_c)$ を計算する。次に、数値 e を次式で計算する； e は大きさが $O(\delta)$ 程度の微小数である。

$$e = \max\{|a'_{m-1}/a'_m|, |a'_{m-2}/a'_m|^{1/2}, \dots, |a'_0/a'_m|^{1/m}\}. \quad (18)$$

e を使い、 $A'(x)$ を次の正規形に変換する； d は e 程度の微小数である。

$$\begin{cases} \bar{A}(x) \stackrel{\text{def}}{=} A'(ex)/a'_m e^m = \bar{a}_n x^n + \cdots + 1 \cdot x^m + \bar{a}_{m-1} x^{m-1} + \cdots + \bar{a}_0, \\ d \stackrel{\text{def}}{=} \max\{|\bar{a}_n|^{1/(n-m)}, \dots, |\bar{a}_{m+1}|^{1/1}\}, \quad \max\{|\bar{a}_{m-1}|, \dots, |\bar{a}_0|\} = 1. \end{cases} \quad (19)$$

$\bar{A}(x)$ を $\bar{A}(x) = H(x)C(x)$, $C(x) = x^m + c_{m-1}x^{m-1} + \dots + c_0$, と分解したい。上記の正規形によると、 $H(x) = 1 + d h_1 x + d^2 h_2 x^2 + \dots + d^{n-m} h_{n-m} x^{n-m}$ となるはずである。ここで d は (19) で与えられ、 $\max\{|h_1|, |h_2|, \dots, |h_{n-m}|\} \approx 1$ である。 d は十分小さいと仮定したから、 $C(x)$ は $\bar{A}(x)$ の m 次以下の $x^m + \bar{a}_{m-1}x^{m-1} + \dots + \bar{a}_0$ で近似できる。そこで、 $H(x)$ と $C(x)$ の初期値を $H(x) \approx H^{(0)} = 1$ かつ $C(x) \approx C^{(0)} = x^m + \bar{a}_{m-1}x^{m-1} + \dots + \bar{a}_0$ において、逐次的に $H(x)$ と $C(x)$ を決定しよう。

$C^{(k)}$ と $H^{(k)}$ を $C(x) = C^{(k)} + O(d^{k+1})$ かつ $H(x) = H^{(k)} + O(d^{k+1})$ を満たすように決定したとして、 $C^{(k+1)}$ と $H^{(k+1)}$ を $\bar{A}(x) = H^{(k+1)}C^{(k+1)} + O(d^{k+2})$ を満たすように決定しよう。 $C^{(k+1)} = C^{(k)} + \Delta_C$ かつ $H^{(k+1)} = H^{(k)} + \Delta_H$ とおけば、 $\bar{A} - C^{(k)}H^{(k)} = \Delta_H C^{(0)} + \Delta_C + O(d^{k+2})$ を得る。 $\deg(\Delta_C) < m$, $\deg(\Delta_H) \leq n-m$ ゆえ、 $C^{(k+1)}$ と $H^{(k+1)}$ は次の算式で決定すればよい。

$$\begin{cases} H^{(k+1)} &= H^{(k)} + \text{quo}(\bar{A} - C^{(k)}H^{(k)}, C^{(0)}), \\ C^{(k+1)} &= C^{(k)} + \text{rem}(\bar{A} - C^{(k)}H^{(k)}, C^{(0)}). \end{cases} \quad (20)$$

$\|C^{(0)}\| = 1 = \text{lc}(C^{(0)})$ であるから、このアルゴリズムは数値的に非常に安定している。

例 1 $A(x) = (x^2 - 1)(x - 0.30)(x - 0.31)(x - 0.35)(x^2 - 0.60x + 0.0925)$ を考える。 $A(x)$ は 0.30 近傍に近接度 $O(0.05)$ の近接根クラスタを持つ。近接根中心の近似値 α'_c は規格 PRS から $\alpha'_c = 0.31139\dots$ と定まる。原点を α'_c に移動すると、 $A'(x) \stackrel{\text{def}}{=} A(x + \alpha'_c)$ は次のようになる。

$$\begin{aligned} A'(x) &= x^7 + 0.61977\dots x^6 - 0.90334\dots x^5 + 0.0030000\dots x^4 - 0.00010000\dots x^3 \\ &\quad + 0.70895\dots \times 10^{-4}x^2 + 0.11466 \times 10^{-5}x - 0.14589\dots \times 10^{-8}. \end{aligned}$$

5 次以下の係数から (18) の e を決めると $e = 0.042814\dots$ を得る。これより $\bar{A}(x)$ が次のように定まる。

$$\begin{cases} \bar{A}(x) &= (-0.0020291\dots x^2 - 0.029374x + 1) \cdot x^5 + C^{(0)}, \\ C^{(0)} &= x^5 - 0.093589\dots x^4 + \dots + x^2 + \dots - 0.011226\dots \end{cases}$$

上述の因子分離アルゴリズムを起動すると、残差 $\Delta^{(k)} \stackrel{\text{def}}{=} \bar{A} - C^{(k)}H^{(k)}$ は以下のように減少する。

$$\begin{aligned} \|\Delta^{(0)}\| &\approx 2.94 \times 10^{-2} \Rightarrow \|\Delta^{(1)}\| \approx 8.00 \times 10^{-4} \Rightarrow \|\Delta^{(2)}\| \approx 4.04 \times 10^{-5} \\ &\dots \Rightarrow \|\Delta^{(8)}\| \approx 4.00 \times 10^{-13} \Rightarrow \|\Delta^{(9)}\| \approx 1.60 \times 10^{-14}. \end{aligned}$$

逆変換をしてみると、 $C(x)$ と $H(x)$ が共に 10^{-15} 程度の精度で分離できていることがわかる。 $\square$

4 クラスタ中の最小根間距離の下界

最小クラスタに対応する因子を $C(x)$ とする、したがって、 $C(x)$ は定理 1 で分離できる近接根クラスタを持たない。この場合、クラスタを 1 程度の大きさに拡大すれば、従来の最小根間距離公式も悪くない値を与えると予想できる。しかし、著者等は独自の公式を導出したい。そのため、 $C(x)$ の近接根は 2 つだけであると仮定する。さらに、近接根クラスタの中心の近似値 α'_c も既知であると仮定する。

以下では、 $\deg(C) = m$ 、 $C(x)$ の m 根を $\gamma_1, \dots, \gamma_m$ 、そのうち γ_1 と γ_2 のみが近接しているとする。

4.1 $|\gamma_1 - \gamma_2|$ に関する下界

定理 1 を使って $|\gamma_1 - \gamma_2|$ の下界を与えよう。 $C(x)$ を次のように正規化し、数値 e を次式で定める。

$$\begin{cases} C(x) &= c_m x^m + \dots + c_3 x^3 + x^2 + c_1 x + c_0, \\ \max\{|c_m|, \dots, |c_3|\} &= 1, \quad e \stackrel{\text{def}}{=} \max\{|c_1|, |c_0|^{1/2}\}. \end{cases} \quad (21)$$

定理 4 $\bar{R}_{\text{in}}$ は、 $\bar{e}$ を e で置き換えることを除き、定理 1 と同じとする。 $e < 1/9$ かつ $|c_1^2 - 4c_0|/4|c_0| > \bar{R}_{\text{in}}/(1 - \bar{R}_{\text{in}})$ ならば、次の不等式が成立する。

$$|\gamma_1 - \gamma_2| > \frac{\sqrt{|c_1^2 - 4c_0| - 4|c_0| \bar{R}_{\text{in}}/(1 - \bar{R}_{\text{in}})} \times (1 - 2\bar{R}_{\text{in}})(1 - \bar{R}_{\text{in}})}{1 + (|c_1|/2)(1 - \bar{R}_{\text{in}})^2/(1 - 2\bar{R}_{\text{in}})^3}. \quad (22)$$

証明 $L(x) = c_m x^{m-2} + \dots + c_3 x + 1$ とおけば $C(x) = L(x)x^2 + c_1 x + c_0$ となる。 $\gamma \in \{\gamma_1, \gamma_2\}$ とすれば、 γ は $L(\gamma)x^2 + c_1 x + c_0$ の根と見做せるので、次式を得る。

$$(\gamma_1 - \gamma_2) - \frac{c_1}{2} \cdot \frac{L(\gamma_1) - L(\gamma_2)}{L(\gamma_1)L(\gamma_2)} = \frac{\sqrt{c_1^2 - 4c_0L(\gamma_1)}}{2L(\gamma_1)} + \frac{\sqrt{c_1^2 - 4c_0L(\gamma_2)}}{2L(\gamma_2)}.$$

$L(\gamma) = 1 + c_3\gamma + \dots + c_m\gamma^{m-2}$ かつ $|\gamma| < \bar{R}_{\text{in}} < 1/3$ ゆえ、 $|L(\gamma)|$ は次のように抑えられる。

$$1 - \bar{R}_{\text{in}}/(1 - \bar{R}_{\text{in}}) < |L(\gamma)| < 1 + \bar{R}_{\text{in}}/(1 - \bar{R}_{\text{in}}). \quad (23)$$

したがって、 $|L(\gamma_1) - L(\gamma_2)| = |\gamma_1 - \gamma_2| \cdot |c_3 + c_4(\gamma_1 + \gamma_2) + c_5(\gamma_1^2 + \gamma_1\gamma_2 + \gamma_2^2) + \dots| < |\gamma_1 - \gamma_2| \cdot (1 + 2|\gamma| + 4|\gamma|^2 + \dots) = |\gamma_1 - \gamma_2|/(1 - 2|\gamma|) < |\gamma_1 - \gamma_2|/(1 - 2\bar{R}_{\text{in}})$ を得る。 $R(\gamma) = \sqrt{c_1^2 - 4c_0L(\gamma)}/2L(\gamma)$ とおき、 $|R(\gamma_1) + R(\gamma_2)|$ の下界を求める。 γ_1 と γ_2 は $C(x)$ の異なる 2 根であるが、このことを無視し、 $L(\gamma_1)$ と $L(\gamma_2)$ を制約 (23) の下で勝手に変化させて下界を求める。そうすると、 $|R(\gamma)|$ の分子は

$$\sqrt{|c_1^2 - 4c_0L(\gamma)|} > \sqrt{|c_1^2 - 4c_0| - 4|c_0| \bar{R}_{\text{in}}/(1 - \bar{R}_{\text{in}})}$$

と抑えられる。 $L(\gamma)$ が複素数であることを考慮すると、 $|1/L(\gamma_1) + 1/L(\gamma_2)|$ は次式で抑えられる。

$$\left| \frac{1}{L(\gamma_1)} + \frac{1}{L(\gamma_2)} \right| = \frac{|L(\gamma_1) + L(\gamma_2)|}{|L(\gamma_1)L(\gamma_2)|} > 2(1 - 2\bar{R}_{\text{in}})(1 - \bar{R}_{\text{in}}).$$

これらをまとめると、定理を得る。 □

4.2 基礎的補題

定理 4 はやや複雑なので、別の公式を探索する。本節と次節では、 $C(x)$ を次のように正規化する。

$$\begin{cases} C(x) = x^m + c_{m-1}x^{m-1} + \dots + c_2x^2 + c_1x + c_0, \\ \max\{|c_{m-1}|, \dots, |c_2|\} = 1 \gg |c_1|, |c_0|, \\ 1/d = \max\{|c_3/c_2|, |c_4/c_2|^{1/2}, \dots, |1/c_2|^{1/(m-2)}\}. \end{cases} \quad (24)$$

$\sigma = (\gamma_1 + \gamma_2)/2$ かつ $\hat{\gamma} = (\gamma_1 - \gamma_2)/2$ とおき、 $H(x)$ と数値 η を次のように定める。

$$\begin{cases} C(x) = H(x) \cdot (x - \sigma - \hat{\gamma})(x - \sigma + \hat{\gamma}), \\ H(x) = x^{m-2} + h_{m-3}x^{m-3} + \dots + h_1x + h_0, \\ 1/\eta = \max\{|h_1/h_0|, |h_2/h_0|^{1/2}, \dots, |1/h_0|^{1/(m-2)}\}. \end{cases} \quad (25)$$

$c_0, c_1, c_2, \dots$ を $h_0, h_1, h_2, \dots$ で表せば、 $c_0 = (\sigma^2 - \hat{\gamma}^2)h_0$, $c_1 = (\sigma^2 - \hat{\gamma}^2)h_1 - 2\sigma h_0$, $c_j = (\sigma^2 - \hat{\gamma}^2)h_j - 2\sigma h_{j-1} + h_{j-2}$ ($j \geq 2$) を得る。これらより、次式が得られる。

$$\frac{c_1}{c_0} = -\frac{2\sigma}{\sigma^2 - \hat{\gamma}^2} + \frac{h_1}{h_0}, \quad \frac{c_2}{c_0} = \frac{1}{\sigma^2 - \hat{\gamma}^2} - \frac{2\sigma}{\sigma^2 - \hat{\gamma}^2} \frac{h_1}{h_0} + \frac{h_2}{h_0}.$$

これらの式から σ と $\hat{\gamma}$ を解くと次式を得る (γ_1 と γ_2 は $C_2x^2 + C_1x + 1$ の根である)。

$$2\sigma = \gamma_1 + \gamma_2 = -\frac{C_1}{C_2}, \quad 2\hat{\gamma} = \gamma_1 - \gamma_2 = \frac{\sqrt{C_1^2 - 4C_2}}{C_2}, \quad (26)$$

$$C_1 = \frac{c_1}{c_0} - \frac{h_1}{h_0}, \quad C_2 = \frac{c_2}{c_0} - \frac{c_1}{c_0} \frac{h_1}{h_0} + \frac{h_1^2}{h_0^2} - \frac{h_2}{h_0}. \quad (27)$$

c_j と h_j ($j \geq 2$) に関する上記の関係式より、さらに次式が得られる。

$$\frac{c_j}{c_2} = \frac{(h_{j-2}/h_0) - 2\sigma(h_{j-1}/h_0) + (\sigma^2 - \hat{\gamma}^2)(h_j/h_0)}{1 - 2\sigma(h_1/h_0) + (\sigma^2 - \hat{\gamma}^2)(h_2/h_0)} \quad (j \geq 3). \quad (28)$$

補題 1 $|C_1|, |C_2|$ および $|C_1^2 - 4C_2|/|C_2|^2$ に対し、次の不等式が成立する。

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{|c_1|}{|c_0|} - \frac{1}{\eta} \leq |C_1| \leq \frac{|c_1|}{|c_0|} + \frac{1}{\eta}, \\ \frac{|c_2|}{|c_0|} - \frac{1}{\eta} \frac{|c_1|}{|c_0|} - \frac{2}{\eta^2} \leq |C_2| \leq \frac{|c_2|}{|c_0|} + \frac{1}{\eta} \frac{|c_1|}{|c_0|} + \frac{2}{\eta^2}, \\ \frac{|c_1^2 - 4c_2c_0| - 2|c_1c_0|/\eta - 7|c_0|^2/\eta^2}{(|c_2| + |c_1|/\eta + 2|c_0|/\eta^2)^2} \leq |C_1^2 - 4C_2|/|C_2|^2. \end{array} \right. \quad (29)$$

証明 η の定義から $|h_j/h_0| \leq 1/\eta^j$ ($j = 1, 2, \dots$) が得られる。これらの不等式と等式 $C_1^2 - 4C_2 = (c_1/c_0)^2 - 4(c_2/c_0) + 2(c_1/c_0)(h_1/h_0) - 3(h_1/h_0)^2 + 4(h_2/h_0)$ から、直ちに上記の不等式が得られる。□

補題 2 $|\sigma|/\eta \ll 1$ かつ $|\sigma^2 - \hat{\gamma}^2|/\eta^2 \ll 1$ ならば、次の不等式が成立する。

$$\frac{1 - 2|\sigma|/\eta - |\sigma^2 - \hat{\gamma}^2|/\eta^2}{1 + 2|\sigma|/\eta + |\sigma^2 - \hat{\gamma}^2|/\eta^2} \leq \frac{\eta}{d} \leq \frac{1 + 2|\sigma|/\eta + |\sigma^2 - \hat{\gamma}^2|/\eta^2}{1 - 2|\sigma|/\eta - |\sigma^2 - \hat{\gamma}^2|/\eta^2}. \quad (30)$$

証明 (28) 右辺の式を R_j とおく。 R_j は不等式 $|h_{j'}/h_0| \leq 1/\eta^{j'}$ ($j' = j, j-1, j-2$) で容易に抑えることができる。得られた不等式と、任意の正整数 j と $0 < r < 1$ なる任意の実数 r に対して成立する不等式 $[(1+r)/(1-r)]^{(1/j)} \leq (1+r)/(1-r)$ を $|c_j/c_0| = |R_j|^{1/j}$ に適用すれば、上記の上界が得られる。

$1/\eta = |h_{j''}/h_0|^{1/j''}$ が成立する正整数 j'' が存在する。 $j = j'' + 2$ に対しては、 $|(h_{j''}/h_0) - 2\sigma(h_{j''+1}/h_0) + (\sigma^2 - \hat{\gamma}^2)(h_{j''+2}/h_0)| \geq (1/\eta^{j''}) \cdot (1 - 2|\sigma|/\eta - |\sigma^2 - \hat{\gamma}^2|/\eta^2)$ が成立する。この不等式で (28) の $|c_j/c_2|$ を抑え、 $0 < r < 1$ なる任意の実数に対して成立する不等式 $[(1-r)/(1+r)]^{(1/j)} \geq (1-r)/(1+r)$ を用いると、上記の下界も得られる。□

4.3 最小根間距離の下界公式

現在、 α'_c のよい上界はない。したがって、著者等は c_2, c_1, c_0 に対して次の現実的な条件を課す。

$$|c_1/c_2|^2 < |c_0/c_2| \iff |c_1|^2 < |c_2c_0|. \quad (31)$$

通常、この条件は満たされるが、不幸にして満たされない場合には、満たされるように原点を少し移動するものとする。この条件の下、数値 e を次のように定める。

$$e \stackrel{\text{def}}{=} \max\{|c_1/c_2|, |c_0/c_2|^{1/2}\} = |c_0/c_2|^{1/2}. \quad (32)$$

$C(x)$ を $C(x) \mapsto \bar{C}(x) = C(dx)/c_2d^2 = \bar{c}_m x^m + \dots + x^2 + \bar{c}_1 x + \bar{c}_0$ と正規化し、 $\bar{e} = \min\{|\bar{c}_1|, |\bar{c}_0|^{1/2}\}$ と定める。このとき $\bar{e} = e/d$ となることを注意しておく。

定理 5 $\bar{R}_{\text{in}}$ は定理 1 における $\bar{R}_{\text{in}}$ で $\bar{e}$ を e/d で置き換えたものとする。3 次多項式 $y^3 - (1 - 2\bar{R}_{\text{in}})y^2 + \bar{R}_{\text{in}}(2 + \bar{R}_{\text{in}})y + \bar{R}_{\text{in}}^2$ が 3 実根を持つように $\bar{R}_{\text{in}}$ を選び、最大根を η_{min}/d と定める (η_{min} は η の最小値で、1 よりやや小さい)。 $e/d < 0.03$ かつ $|c_1|^2 < |c_2c_0|$ ならば、次の不等式が成立する。

$$|\gamma_1 - \gamma_2|^2 > \frac{|c_1^2 - 4c_2c_0| - 2|c_1c_0|/\eta_{\text{min}} - 7|c_0|^2/\eta_{\text{min}}^2}{(|c_2| + |c_1|/\eta_{\text{min}} + 2|c_0|/\eta_{\text{min}}^2)^2}. \quad (33)$$

証明 $e/d < 0.03$ のとき $\bar{R}_{\text{in}} < 0.0621\dots$ となり、上記 3 次多項式は 3 実根を持つことを注意しておく。 $C(x)$ は (24) のように正規化されているから、 $|\gamma_1|, |\gamma_2| < \bar{R}_{\text{in}}d$ であり、 $|\sigma|/\eta < \bar{R}_{\text{in}}(d/\eta)$ かつ $|\sigma^2 - \gamma^2|/\eta^2 < \bar{R}_{\text{in}}^2(d/\eta)^2$ である。したがって、 $y = \eta/d$ とおくと (30) は次式となる。

$$\frac{y^2 - 2\bar{R}_{\text{in}}y - \bar{R}_{\text{in}}^2}{y^2 + 2\bar{R}_{\text{in}}y + \bar{R}_{\text{in}}^2} < y < \frac{y^2 + 2\bar{R}_{\text{in}}y + \bar{R}_{\text{in}}^2}{y^2 - 2\bar{R}_{\text{in}}y - \bar{R}_{\text{in}}^2}.$$

$\bar{R}_{\text{in}} = 0$ のとき $y = 1$ であるから、上式より η_{min} は定理のように抑えられる。したがって、(29) の第三式で η を η_{min} で置き換えれば、(33) が得られる。□

系 3 $e/d \geq 0.03$ ならば次の不等式が成立する。

$$|\gamma_1 - \gamma_2| \geq 0.03d \cdot \frac{\sqrt{3 - 2\varepsilon - 7\varepsilon^2}}{1 + \varepsilon + 2\varepsilon^2}, \quad \text{where } \varepsilon = 0.0442\dots \quad (34)$$

証明 γ_1 と γ_2 の近接根クラスタが分離でき、かつ (30) が成立するきわどい場合として $\bar{e} = e/d = 0.03$ とする (この数値は $1/9$ に比べればかなり小さい)。この場合、 $|c_1/c_2| \leq 0.03d$, $|c_0/c_2| = (0.03d)^2$, $\bar{R}_{\text{in}} = 0.0621\dots$, そして $\eta_{\text{min}}/d = 0.678\dots$ となる。 $(\varepsilon = \bar{e}\eta_{\text{min}}/d = 0.0442\dots)$ 。 $|c_1^2 - 4c_2c_0|$ を $|c_1^2 - 4c_2c_0| \geq |4c_2c_0| - |c_1|^2$ と抑えるなら、(33) の右辺は $\bar{e} \in [0, 1]$ に対して単調増加である。したがって、(33) 右辺の $|c_1/c_2|$ などに実際の値を代入すれば、(34) が得られる。□

参 考 文 献

- [英文論文] T. Sasaki and F. Kako: An algebraic method for separating close-root clusters and the minimum root separation. Preprint (16 pages), Jan. 2005.
- [CH74] G.E. Collins and E. Horowitz: The minimum root separation of a polynomial. *Math. Comp.* **28** (1974), 589–597.
- [Col01] G.E. Collins: Polynomial minimum root separation. *J. Symb. Comp.* **32** (2001), 467–473.
- [IS04] D. Inaba and T. Sasaki: Certification of analytic continuation of algebraic functions. *Proc. CASC2004*, (Eds. V.G. Ganzha, E.W. Mayr, E.V. Vorozhtsov), 249–260. July 2004.
- [Mig92] M. Mignotte: *Mathematics for Computer Algebra*. Springer-Verlag, 1992, Ch. 4.
- [Pan95] V.Y. Pan: Optimal (up to polylog factors) sequential and parallel algorithms for approximating complex polynomial zeros. *Proc. 27th Ann. ACM Symp. on Theory of Computing*, 741–750. ACM Press, New York, 1995.
- [Pan96] V.Y. Pan: Optimal and nearly optimal algorithms for approximating complex zeros. *Computers & Math. (with Applications)*, **31** (1996), 97–138.
- [Pan01] V.Y. Pan: Univariate polynomials: nearly optimal algorithms for factorization and rootfinding. *Proc. ISSAC 2001*, (Ed. J.R. Sendra), 253–267. ACM Press, 2003.
- [Sas03] T. Sasaki: The subresultant and clusters of close roots. *Proc. ISSAC 2003*, (Ed. B. Mourrain), 232–239. ACM Press, 2001.
- [SN89] T. Sasaki and M-T. Noda: Approximate square-free decomposition and root-finding of ill-conditioned algebraic equations. *J. Inf. Process.* **12** (1989), 159–168.
- [SS89] T. Sasaki and M. Sasaki: Analysis of accuracy decreasing in polynomial remainder sequence with floating-point number coefficients. *J. Inf. Process.*, **12** (1989), 159–168.
- [SST92] T. Sakurai, H. Sugiura and T. Torii: Numerical factorization of polynomial by rational Hermite interpolation. *Numerical Algorithms* **3** (1992), 411–418.
- [ST02] T. Sasaki and A. Terui: A formula for separating small roots of a polynomial. *ACM SIGSAM Bulletin* **36** (2002), 19–29.
- [TS00] A. Terui and T. Sasaki: “Approximate zero-points” of real univariate polynomial with large error terms. *IPJS Journal (Information Processing Society of Japan)* **41** (2000), 974–989.