

27.

代数関数の陰関数描画について

照井 章 (筑波大学)

佐々木 建昭 (筑波大学)

27.1 はじめに

本論では与えられた実係数の 2 変数多項式 $F(x, y)$ に対し、 $F(x, y) = 0$ の根として定まる代数関数 $y = f(x)$ を実平面上に描画することを考える。もしも関数 $f(x)$ が具体的に決まれば、 x の値 x_0 を少しずつ変えながら点 $(x_0, f(x_0))$ をプロットすることにより、 $y = f(x)$ のグラフを描くことができる。しかし、5 次以上の多項式では一般に $f(x)$ を根基で表し得ないし、たとえ根基表現できるとしても、その表現を得るには多大な時間がかかる。ところで、 $F(x, y) = 0$ の根として定まる代数関数のグラフを描くだけなら、次のようにするのが实际的である。ここでは二つの代表的方法を述べる。

第一の方法であるが、 y_0 は関数を表示すべき y の区間内の値であるとする。まず、 y_0 を $F(x, y)$ に代入して、 x に関する実係数の方程式 $F(x, y_0) = 0$ を得る。次に、この方程式を数値的方法で解くことにより、 y_0 に対応する実根の近似値 $x_{0,1}, \dots, x_{0,m}$ (ただし、 $m \leq [F(x, y_0)$ の次数]) を計算し、点 $(x_{0,1}, y_0), \dots, (x_{0,m}, y_0)$ をプロットする。関数を表示させる範囲の中で、 y_0 の値を少しずつ変えながらこの手順を繰り返せば、 F のグラフが描画できる。

第二の方法では、 y_0 は上記の実数値とし、まず $F(x_0, y_0) = 0$ を満たす実数の組 (x_0, y_0) を何らかの方法で計算する。次に、 $\partial F(x, y)/\partial x$ と $\partial F(x, y)/\partial y$ を使って、 $F(x_0 + \delta x, y_0 + \delta y) = 0$ を満たすように実微小量 $\delta x, \delta y$ を決める。以下、これを繰り返して曲線を追跡するのである [TS 92]。

上記二つの方法を比較した場合、計算量的には第二の方法が優れていると思われるが、あとで説明する“孤立零点”も含めて、もれなく曲線を表示するという点では第一の方法が簡単である。さらに、第一の方法は、実係数の 3 変数多項式 $F(x, y, z)$ に対し、 $F(x, y, z) = 0$ の根として定まる曲面

$z = f(x, y)$ を実 3 次元空間に描画する方法などへの拡張が容易である。従って、本論では第一の方法を論じることにする。

上記第一の方法を実際に実行する場合、次の 2 点が問題になる。一つは実係数の 1 変数方程式 $F(x, y_0) = 0$ のすべての実根を効率よく求めることであり、他の一つは特異点の近傍でグラフを正確に描画することである。特に、孤立零点を見落とさないことがなかなか難しい。

実根の計算については、古くからよく知られた Sturm の方法 [Iri 81] があり、数式処理の分野ではよく研究され、多用されている。しかし、Sturm の方法は実根を任意の微小区間内に決定できるが、実際に使用するには次の二つの問題点がある。第一に、この方法は代数的な計算を数多く繰り返すため、計算に非常に時間がかかる。第二に、離散的な y 座標値に対して実根を計算するため、孤立零点を見落とす可能性が非常に大きい。(この点に関して、「近似 GCD を使って (近似) 実根を計算するならば、孤立零点を見落とすことがない」との福井の指摘がある [Fukui 95]。)

一方、数値計算の分野では、1 変数多項式の根の近似値の計算に Durand-Kerner 法 [Durand 60] [Kerner 66] が広く用いられているが、Durand-Kerner 法は Sturm の方法に比べて次の点で有利である。第一に、計算方法が単純で、効率よく根の近似値を求めることができる。第二に、与えられた多項式に対し、虚根も含めた全ての根を計算する。後述のように、本来は不要であるはずの虚根が孤立零点の検出に役立つのである。

本論では、このような Durand-Kerner 法の長所を利用し、陰関数を効率良く描画するための方法を提案する。特に、孤立零点の存在を判断する実際的な方法を提案する。

27.2 実多項式用 Durand-Kerner 法

Durand-Kerner 法は一般に複素係数の多項式の根の近似値を求める反復算法であるが、その初期値は複素数であるので、方程式が実根を持つ場合、かなり反復が進んだ段階でも実根の近似値は微小な虚部を持ち、それが実根の近似値であるかどうかの判定が難しい。一方、陰関数の描画では実係数の多項式のみを扱うので、実係数の多項式の根の性質を用いることによって初期値を上手に定め、以下に述べるように、実根と虚根の近似値を常に区別した形で効率的に計算することができる。

Durand-Kerner の 2 次法では、複素係数の多項式 $p(z) = a_0 z^n + a_1 z^{n-1} + \cdots + a_{n-1} z + a_n$ ($a_0 \neq 0$) に対し、その根の初期“近似値” $(z_1^{(0)}, z_2^{(0)}, \dots, z_n^{(0)})$ を与え、以下の反復式によって $p(z) = 0$ の全根の近似値を同時に求める。

$$z_i^{(\nu+1)} = z_i^{(\nu)} - \frac{p(z_i^{(\nu)})}{a_0 q'(z_i^{(\nu)})}, \quad i = 1, \dots, n \quad (\text{ただし } q(z) = \prod_{j=1}^n (z - z_j^{(\nu)}) \quad (27.1))$$

初期値 $(z_1^{(0)}, z_2^{(0)}, \dots, z_n^{(0)})$ としては、Aberth の初期値 [Aberth 73] を修正したものがよく使われている。

以下では、 $p(z)$ は実係数の多項式であるとする。このとき、 $\zeta \in \mathbb{C}$ が方程式 $p(z) = 0$ の一つの根であるならば、 ζ の複素共役 $\bar{\zeta}$ もまた $p(z) = 0$ の根である。このことから、 $p(z) = 0$ に対する Durand-Kerner 法における根の初期値を次のように定める。

1. Sturm の定理を用いて $p(z) = 0$ の実根の個数を求め、その個数を m とする。
2. Aberth の初期値を求める方法に従って、根の重心 β と根の絶対値の上限 r_0 を求める。
3. 実根に対する初期値を次式で定める。

$$z_k^{(0)} = \beta + r_0 - k \left(\frac{2r_0}{m+1} \right), \quad k = 1, \dots, m \quad (27.2)$$

4. 複素根に対する初期値を次式で定める。

$$\left. \begin{aligned} \Re z_k^{(0)} &= \beta + r_0 - k \left(\frac{4r_0}{n-m+2} \right) \\ \Im z_k^{(0)} &= \sqrt{r_0^2 - (\beta - \Re z_k^{(0)})^2} \\ z_{k+1}^{(0)} &= \overline{z_k^{(0)}} \end{aligned} \right\}, \quad k = m+1, m+3, \dots, n-1 \quad (27.3)$$

初期値を上のように定めて Durand-Kerner 法を実行する場合、実軸上の近似根は実軸上を移動し、それ以外の互いに複素共役な近似根は互いに複素共役な関係を保つことが次の命題で保証される。

命題 1 $p(z)$ を実係数の多項式とし、方程式 $p(z) = 0$ に対して、式 (27.2), (27.3) によって初期値を定め、式 (27.1) で根の近似値を計算するものとする。このとき、 $l = 0, 1, 2, \dots$ に対して、次が成り立つ。

1. $z_i^{(0)}$ が実数ならば、 $z_i^{(l)}$ も実数である。
2. $z_i^{(0)}$ と $z_{i+1}^{(0)}$ が互いに複素共役ならば、 $z_i^{(l)}$ と $z_{i+1}^{(l)}$ も互いに複素共役である。 $\square$

上記の命題は Durand-Kerner の 3 次法に対しても成立することが容易に示される。

上に述べた方法で初期値を定める Durand-Kerner 法を、以下では実多項式用 Durand-Kerner 法と呼ぶ。上記の方法を実際に適用する場合、互いに共役な虚根は一方のみを計算すればよく（他方はその複素共役とする）、計算効率の点でも若干の改善となることを注意しておく。なお、上記の初期値の定め方においては、Sturm の定理は実根の位置の決定にではなく、個数の決定にだけ使われていることに注意されたい。実根の位置を決定するには、Sturm 列を計算し、根を含む区間を $1/2, 1/4, 1/8, \dots$ と縮めながら Sturm 列の値を計算しなければならないが、実根の個数の決定には Sturm 列の主係数の符号変化を見るだけでよい。

27.3 孤立零点を含めた特異点の検出方法

関数を描画する際に問題になるのが孤立零点の検出であるが、まず、孤立零点について簡単に説明しておく。例として、次の多項式 $F(x, y)$ を考える。

$$F(x, y) = x^5 - x^4 - y^2 \quad (27.4)$$

方程式 $F(x, y) = 0$ の根として $y = \pm x^2 \sqrt{x-1}$ があるが、これは実平面上では（原点を通らない）連続曲線となる。このほかに、原点 $(0, 0)$ も式 (27.4) の根であることがわかるが、この根は実平面上では孤立している。この例が示すように、方程式 $F(x, y) = 0$ の根の中には時として、実平面上で連続曲線にならず、孤立した点となるものが現われるが、このような点を本論では孤立零点と呼ぶ。

さて、 $F(x, y) = 0$ の根 $x = g(y)$ は y の代数関数で、 $F(x, y)$ が既約な場合、複素 Riemann 面上では連続した一価曲線になる。したがって、孤立零点も複素空間内では実平面を貫く連続した曲線上の一点である。 $F(x, y_0)$ は実多項式であり、虚根は互いに複素共役になっているから、孤立零点は重根（多重度は偶数）でなければならない。すなわち、孤立零点は代数幾何の意味で特異点であり、その点の近傍で $x = g(y)$ は一般に Puiseux 級数展開される。

$F(x, y)$ が (27.4) のとき、 $y = 0$ の近傍で $g(y)$ は次のように Puiseux 級数展開される。

$$x = g(y) = \begin{cases} 1 + y^2 - 4y^4 + 26y^6 + \dots \\ \pm \frac{1}{\sqrt{2}}(1+i)y^{1/2} \pm \frac{i}{4}y \pm \frac{7}{32\sqrt{2}}(-1+i)y^{3/2} + \dots \\ \pm \frac{1}{\sqrt{2}}(1-i)y^{1/2} \mp \frac{i}{4}y \pm \frac{7}{32\sqrt{2}}(-1-i)y^{3/2} + \dots \end{cases} \quad (27.5)$$

もちろん、孤立零点の近傍で $g(y)$ が Taylor 展開されることもある。このように、 $(\hat{x}, \hat{y})$ が孤立零点のとき、 $\hat{y}$ の近傍 $\hat{y} + \delta y$ で $F(x, \hat{y} + \delta y) = 0$ の虚根は一般に複雑な挙動をするが、いずれにせよ Puiseux 級数あるいは Taylor 級数の範囲内で展開できる。したがって、互いに複素共役な虚根が実軸に近づく様子を観察することにより、孤立零点が容易に検出できると考えられる。

多項式の孤立零点を含めた特異点の位置を正確に知るには、次の2つの方法が考えられる。

1. [純数値的方法] まず特異点の大雑把な位置を定め、その点の近傍で y 座標のきざみ幅を小さくして関数値をプロットし、位置を正確に定める。必要ならば、関数を表示させる範囲の x の値 x_0 に対し、方程式 $F(x_0, y) = 0$ の根 y を求めることにより、関数値をプロットする。
2. [代数演算を利用する方法] $F = \partial F / \partial x = 0$ の根を（数値的に）求める。具体的には、

$$R_0(y) = \text{resultant}_x(F, \partial F / \partial x) \quad (27.6)$$

の根を計算することにより、（曲線 $x = g(y)$ が交わる）特異点の y 座標をまず計算する。

方法 1 は計算の速さの点で魅力的であるが、実際に適用する場合にはよほど算法を工夫しないと安定性の面で問題が残る。特異点の近傍では関数は異常に振舞うことが多く、いくつかの例を試したところ、特異点の大雑把な位置を知ることさえ簡単ではないことがわかった。一方、方法 2 では、浮動小数係数多項式の終結式計算法を工夫する必要があるが、 $R_0(y)$ の根が精度よく決まりさえすれば、以下に述べるようにグラフ描画が非常に簡単になる。したがって、我々は方法 2 を採用することにした。

さて、方法 2 において、方程式 $R_0(y) = 0$ の根の 1 つを $\hat{y}$ とし、多項式 $F(x, y)$ が $y = \hat{y}$ において孤立零点 $(\hat{x}, \hat{y})$ を持つとする。この場合、我々が得る値は通常 $\hat{y}$ の近似値 $\tilde{y}$ であるので、方程式 $F(x, \tilde{y}) = 0$ の根を実多項式用 Durand-Kerner 法で計算した場合、前章のステップ 1 の Sturm 法が実根の個数を正しく与えるとは限らない（実は失敗する方が多い）。このような場合、 $\tilde{y} \simeq \hat{y}$ となっているのであるから、 $F(x, \tilde{y}) = 0$ の根として孤立零点 $\hat{y}$ の近傍に互いに複素共役な虚根があるはずで、しかもこれらの虚根の虚部は $\tilde{y} \rightarrow \hat{y}$ とともに 0 に近づく。したがって、 $F(x, \tilde{y}) = 0$ の虚根を観察し、互いに複素共役な虚根が実平面を貫く挙動をした時に孤立零点と判定すればよい。

27.4 グラフ描画の具体的方法

実際にグラフを描画する際には、実多項式用 Durand-Kerner 法を用いて求めた $F(x, y)$ の零点どうしを直線で結んでグラフを多角形で近似することになるが、この時、零点どうしをどのように結べばよいかが問題になる。 y_1, y_2 を実数値とし、 $y_1 < y_2$ とする。また、

方程式 $F(x, y_1) = 0$ の実根を $x_{11}, \dots, x_{1r}$, ただし $x_{11} < \dots < x_{1r}$,

方程式 $F(x, y_2) = 0$ の実根を $x_{21}, \dots, x_{2s}$, ただし $x_{21} < \dots < x_{2s}$

とする。このとき、次の命題が成立する。

命題 2 実平面上で区間 $[y_1, y_2]$ に特異点がないならば、 $r = s$ で、かつ実平面上でのグラフは x_{1i} と x_{2i} ($i = 1, \dots, r$) がそれぞれ連結されたものとなり、この区間でグラフが交差することはない。□

上記の命題によれば、特異点の y 座標さえ正確に求まれば、グラフ描画は実に簡単に行えることがわかる。さらに、区間 $[y_1, y_2]$ が特異点から充分離れているときは、 $[y_1, y_2]$ では y 軸のきざみ幅 δy を少々粗くしてもよいことがわかる。ゆえに、多項式 $F(x, y) = 0$ の根として定まる代数関数 $x = g(y)$ の実際の描画を、次の要領で行うことにする。

1. $R_0(y) = \text{resultant}_x(F, \partial F / \partial x)$ とおき、方程式 $R_0(y) = 0$ を実多項式用 Durand-Kerner 法を用いて解くことにより、(曲線 $x = g(y)$ が交わる) 特異点の y 座標 $\hat{y}_1, \dots, \hat{y}_n$ を得る。
2. $|\hat{y}_{i+1} - \hat{y}_i| > 0.1$ ($i = 1, \dots, n-1$) の場合、 $\hat{y}_i + 0.05 < y < \hat{y}_{i+1} - 0.05$ なる y の値においては、まず $y_0 = (\hat{y}_i + \hat{y}_{i+1})/2$ における $F(x, y_0) = 0$ の根を実多項式用 Durand-Kerner 法を用いて求める。次に、 $\delta = 0.1$ とし、順に $y_1 = y_0 + \delta, y_2 = y_0 + 2\delta, \dots \leq \hat{y}_{i+1} - 0.05$ および $y_{-1} = y_0 - \delta, y_{-2} = y_0 - 2\delta, \dots \geq \hat{y}_i + 0.05$ における $F(x, y_{\pm j}) = 0$ の根を実多項式用 Durand-Kerner 法で計算する。ただし、 $y_{\pm(j+1)}$ での計算における初期値は $y_{\pm j}$ での根を用いる。(これにより、 $y_{\pm j+1}$ での計算は 2~3 回の反復で収束する。)
3. $\hat{y}_i$ ($i = 1, \dots, n$) の周りおよび $|\hat{y}_{i+1} - \hat{y}_i| \leq 0.1$ ($i = 1, \dots, n-1$) の場合は、 $\delta = 0.01$ とし、上記と同様に $y_1 = \hat{y}_i + \delta, y_2 = \hat{y}_i + 2\delta, \dots \leq \hat{y}_i + 0.05$ および $y_{-1} = \hat{y}_i - \delta, y_{-2} = \hat{y}_i - 2\delta, \dots \geq \hat{y}_i - 0.05$ における $F(x, y_{\pm j}) = 0$ の根を同様に計算する。虚根の中で虚部が小さい根が存在する場合には、 $\hat{y}_i$ を飛び越えて y の値を変化させるときそれらの根が実平面を貫くかどうかを調べ、貫く場合にはそこにも零点があると判定する。この零点の近傍に他の実根が存在しなければ、それは孤立零点である。
4. 得られた根を本節最初に述べたように直線で結ぶ。

以下は上記の手順の実行例である。ただし、どのように点がプロットされたかを示すため、ステップ 4 は実行させていない。

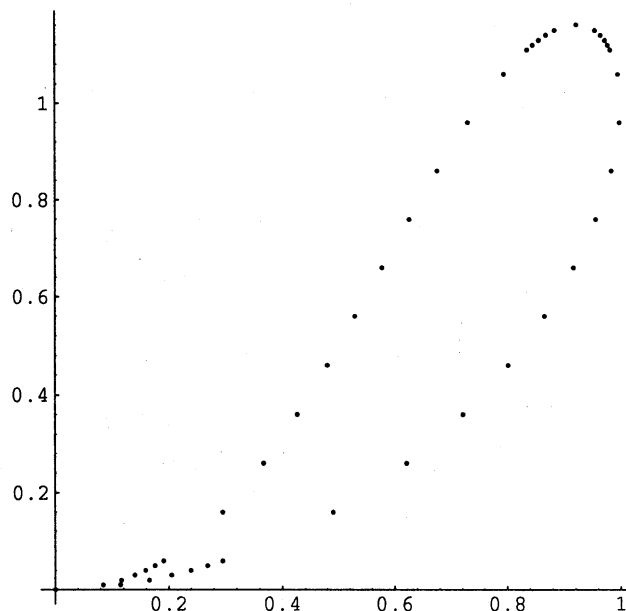


図 27.1 $F(x, y) = x^4 + x^2 y^2 - 2x^2 y - x y^2 + y^2$ の描画例：わかりやすさのため、プロットされた点を結ぶステップ (ステップ 4) は実行されていない

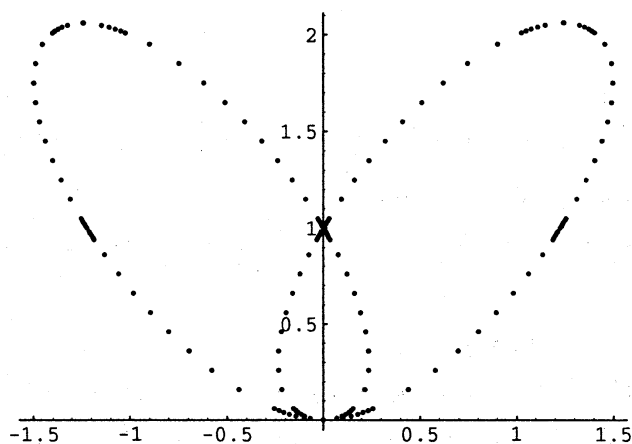


図 27.2 $F(x, y) = 2x^4 - 3x^2y + y^2 - 2y^3 + y^4$ の描画例：グラフが y 軸方向に見て重根を持つ箇所は細かくプロットされている

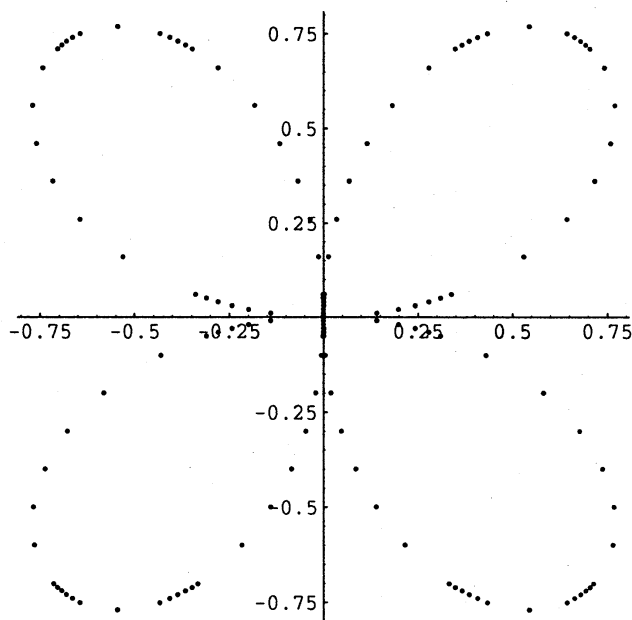


図 27.3 $F(x, y) = (x^2 + y^2)^3 - 4x^2y^2$ の描画例：この例では、原点付近が正確に描けるかどうかポイントであるが、問題点をうまくクリアしている

参考文献

- [Aberth 73]O. Aberth, "Iteration Methods for Finding all Zeros of a Polynomial Simultaneously," Math. Comput., Vol. 27, 339–344, 1973.
- [Durand 60]E. Durand, *Solutions Numériques des Équations Algébriques*, Tome I, Masson et Cie, Paris, 1960.
- [Fukui 95]福井哲夫, private communication.
- [Iri 81]伊理正夫, 数値計算 (理工系基礎の数学 12), 第 3 章, 朝倉書店, 1981.
- [Kerner 66]I. O. Kerner, "Ein Gesamtschrittverfahren zur Berechnung der Nullstellen von Polynomen," Numer. Math., Vol. 8, 290–294, 1966.
- [KMS 95]近藤祐史, 三好善彦, 齋藤友克, 陰関数描画に関する一つの試み, 数理解析研究所講究録 "数式処理の理論と応用に関する研究", 京都大学数理解析研究所, Vol. 920, 165–172, 1995.
- [TS 92]谷口行伸, 杉原厚吉, 検出もれない代数曲線の追跡法, 情報処理学会論文誌, 第 33 卷, 1245–1253, 1992.