Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Л. С. Чхартшвили, Решение алгебраического уравнения с помощью иррациональной итерационной функции, *Матем. заметки*, 2012, том 92, выпуск 5, 778–785

DOI: <https://doi.org/10.4213/mzm4739>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.166.219.16

26 апреля 2023 г., 14:38:55

Решение алгебраического уравнения с помощью иррациональной итерационной функции

Л. С. Чхартишвили

Доказано, что при выборе $z_n^{[0]} = -a_1$ в качестве начального приближения последовательность приближений $z_n^{[i+1]} = \varphi_n(z_n^{[i]})$, $[i] = 0, 1, 2, \dots$, решения канонического алгебраического уравнения

$$P_n(z) = z^n + a_1 z^{n-1} + a_2 z^{n-2} + \dots + a_n = 0, \quad n = 1, 2, \dots,$$

с действительными положительными корнями, генерированная иррациональной итерационной функцией $\varphi_n(z) = (z^n - P_n(z))^{1/n}$, сходится к наибольшему корню z_n . Приводятся примеры численной реализации метода для задачи определения энергетических уровней электронных систем в молекуле и кристалле. Рассмотрена возможность построения аналогичных иррациональных итерационных функций, предназначенных для решения алгебраического уравнения общего вида.

Библиография: 7 названий.

1. Введение. Алгебраическое уравнение общего вида n -й степени, $n = 1, 2, \dots$, относительно комплексной неизвестной z представляется как

$$P_n(z) = z^n + a_1 z^{n-1} + a_2 z^{n-2} + \dots + a_n = 0. \quad (1.1)$$

Эта форма каноническая – коэффициент главного члена полинома $P_n(z)$ в левой части уравнения приведен к 1, $a_0 = 1$. Что касается остальных коэффициентов a_i , $i = 1, 2, \dots, n$, то они являются заданными комплексными числами. При этом без ограничения общности можно предполагать, что свободный член в полиноме отличен от 0, $a_n \neq 0$, и, следовательно, у алгебраического уравнения нет нулевых корней. В противном случае, когда $a_n = a_{n-1} = a_{n-2} = \dots = a_{n-(m-1)} = 0$, но $a_{n-m} \neq 0$, $m \leq n$, и, тем самым, 0 является m -кратным корнем, уравнение следует разделить на z^m и таким путем перейти к алгебраическому уравнению $(n-m)$ -й степени, чьи корни совпадают с отличными от нуля корнями исходного уравнения n -й степени. В общей сложности алгебраическое уравнение n -й степени с учетом кратности обладает n корнями z_i , $i = 1, 2, \dots, n$. Следует обратить внимание, что применяемые методы итерационного решения алгебраического уравнения пользуются рациональными итерационными функциями – рациональными комбинациями переменной z , полинома $P_n(z)$ и его производных. Вместе с тем решения в радикалах, известные для алгебраических уравнений низких степеней, да и просто свойства

симметрии задачи подталкивают к мысли, что итерационную функцию, предназначенную для определения корня алгебраического уравнения n -й степени, естественно и целесообразно представить в иррациональной форме, содержащей извлечение корня n -й степени. В настоящей работе для канонического алгебраического уравнения с действительными положительными корнями сконструирована наиболее простая иррациональная итерационная функция и доказана сходимость генерированной ею последовательности к наибольшему корню вне зависимости от того, является ли этот корень простым или кратным. Затем приводятся примеры численной реализации метода для тестовых задач определения энергетических уровней электронных систем молекулы и кристалла. И наконец, проанализирована возможность построения иррациональных итерационных функций для алгебраического уравнения общего вида.

2. Сходимость последовательности приближений, генерированной иррациональной итерационной функцией. Пусть известно, что уравнение (1.1) обладает лишь действительными положительными корнями. Для определенности будем считать, что они пронумерованы в порядке возрастания значений: $0 < z_1 \leq z_2 \leq z_3 \leq \dots \leq z_n$. Для такого уравнения, где z считается действительной неизвестной, все коэффициенты a_i действительные величины. При этом, по теореме Виета свободный член a_n , по модулю равный произведению корней, отличен от нуля:

$$(-1)^n a_n = \prod_{i=1}^{i=n} z_i \neq 0, \quad (2.1)$$

а коэффициент члена $(n-1)$ -й степени a_1 с обратным знаком совпадает с их суммой:

$$-a_1 = \sum_{i=1}^{i=n} z_i > z_n > 0. \quad (2.2)$$

Согласно основной теореме алгебры [1] полином $P_n(z)$ в левой части канонического уравнения представляется произведением разностей неизвестной и корней:

$$P_n(z) = \prod_{i=1}^{i=n} (z - z_i). \quad (2.3)$$

Из этой формы ясно, что если z не меньше, чем наибольший корень z_n , $z \geq z_n$, то данная функция принимает лишь неотрицательные значения:

$$P_n(z) \geq 0. \quad (2.4)$$

Кроме этого, в указанной области выполняется строгое неравенство

$$z^n > P_n(z). \quad (2.5)$$

Производная полинома $P_n(z)$ выражается суммой аналогичных произведений, из которых однако поочередно изъяты по одному из сомножителей:

$$P'_n(z) = \sum_{j=1}^{j=n} \prod_{j \neq i=1}^{j \neq i=n} (z - z_i). \quad (2.6)$$

Отсюда следует, что при $z \geq z_n$

$$P'_n(z) \geq 0. \quad (2.7)$$

Равенство производной нулю в точке $z = z_n$, $P'_n(z_n) = 0$, имеет место лишь в том случае, когда наибольший корень является кратным: $z_n = z_{n-1}$. Если же он простой, $z_n > z_{n-1}$, то и на границе рассматриваемой области соблюдается строгое неравенство $P'_n(z) > 0$. Из выражений (2.3) и (2.6) при $z \geq z_n$ и $n > 1$ также вытекают следующие неравенства:

$$nz^{n-1} > P'_n(z), \quad (2.8)$$

$$zP'_n(z) \geq nP_n(z). \quad (2.9)$$

Заметим, что равенство в последней формуле имеет место лишь в точке $z = z_n$ при кратности наибольшего корня: $z_n = z_{n-1}$. Преобразуем уравнение (1.1) к виду

$$z = \varphi_n(z), \quad (2.10)$$

где итерационная функция $\varphi_n(z)$ определена в простейшей иррациональной форме

$$\varphi_n(z) = (-a_1z^{n-1} - a_2z^{n-2} - a_3z^{n-3} - \dots - a_n)^{1/n}. \quad (2.11)$$

Поскольку искомые решения положительны, здесь подразумевается арифметическое значение корня. Очевидно, что все корни алгебраического уравнения (1.1) являются неподвижными точками функции (2.11) и наоборот. Если эту итерационную функцию представить в виде

$$\varphi_n(z) = (z^n - P_n(z))^{1/n}, \quad (2.12)$$

то с учетом неравенства (2.5) можно сказать, что при $z \geq z_n$ она определена. В этой области определена и производная итерационной функции

$$\varphi'_n(z) = \frac{nz^{n-1} - P'_n(z)}{n(z^n - P_n(z))^{1-1/n}}, \quad (2.13)$$

так как та равна дроби, в знаменателе которой под радикалом стоит положительное выражение. Согласно неравенству (2.8) положительной является и ее числитель. Отсюда следует положительность производной итерационной функции при $z \geq z_n$:

$$\varphi'_n(z) > 0. \quad (2.14)$$

Данный результат означает, что в области $z \geq z_n$, иррациональная итерационная функция (2.11) возрастающая. Но z_n является ее неподвижной точкой, и на границе, $z = z_n$, значение функции совпадает с ее аргументом: $\varphi_n(z_n) = z_n$. Поэтому при $z \geq z_n$ будем иметь $\varphi_n(z) \geq z_n$. С другой стороны, $\varphi_n(z)$ как алгебраическая функция сублинейна и найдется достаточно большое положительное число Z_n , превосходящее коэффициент главного члена под радикалом и, следовательно, наибольший корень уравнения, $Z_n \geq -a_1 > z_n > 0$, такое что при $z \leq Z_n$ будет выполняться неравенство $\varphi_n(z) \leq Z_n$. Таким образом итерационная функция $\varphi_n(z)$ действует из замкнутого ограниченного интервала $[z_n, Z_n]$ в тот же интервал. С целью оценки

верхней границы значений производной итерационной функции при $z \geq z_n$ заметим, что в таком случае согласно неравенствам (2.4), (2.5) и (2.7)–(2.9)

$$0 \leq \frac{P_n(z)}{z^n} < 1, \quad (2.15)$$

$$0 \leq \frac{P'_n(z)}{nz^{n-1}} < 1, \quad (2.16)$$

$$0 \leq \frac{P_n(z)}{z^n} \leq \frac{P'_n(z)}{nz^{n-1}}. \quad (2.17)$$

Поэтому в указанной области будем иметь

$$\varphi'_n(z) = \frac{1 - P'_n(z)/nz^{n-1}}{(1 - P_n(z)/z^n)^{1-1/n}} < \frac{1 - P'_n(z)/nz^{n-1}}{1 - P_n(z)/z^n} \leq 1. \quad (2.18)$$

Тем самым, в интервале $[z_n, Z_n]$ выполняется достаточное условие сходимости итераций [2]: $|\varphi'_n(z)| < 1$. Следовательно, если начальное приближение $z_n^{[0]}$ взять из этого интервала, то последовательность приближений

$$z_n^{[i+1]} = \varphi_n(z_n^{[i]}), \quad [i] = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.19)$$

будет сходиться к корню z_n . Очевидным выбором, не требующим какого-либо предварительного анализа конкретного алгебраического уравнения, является $z_n^{[0]} = -a_1$. При этом любое приближение к корню линейного алгебраического уравнения ($n = 1$), порождаемое итерационной функцией (2.11), совпадает с его точным значением. Таким образом, доказана

ТЕОРЕМА. Последовательность положительных чисел $z_n^{[i+1]} = \varphi_n(z_n^{[i]})$, $[i] = 0, 1, 2, \dots$, генерированная итерационной функцией

$$\varphi_n(z) = (-a_1 z^{n-1} - a_2 z^{n-2} - \dots - a_n)^{1/n},$$

в которой подразумевается арифметическое значение корня, при выборе в качестве начального члена $z_n^{[0]} = -a_1$ справа сходится к наибольшему корню z_n алгебраического уравнения n -й степени

$$z^n + a_1 z^{n-1} + a_2 z^{n-2} + \dots + a_n = 0, \quad n = 1, 2, \dots,$$

с вещественными положительными корнями.

3. Примеры решения алгебраического уравнения с помощью иррациональной итерационной функции: квазиклассические потенциалы ионизации для электронных систем молекулы дибора и кубического кристалла нитрида бора. Важной сферой приложения итерационных методов решения алгебраических уравнений является расчет электронного энергетического спектра вещества – молекул и кристаллов. Для них математическая задача формулируется в виде векового уравнения с матрицей Гамильтона размера $n \times n$ (n – число учитываемых электронных состояний в молекуле или элементарной ячейке кристалла), характеристическим уравнением для которой служит алгебраическое уравнение n -й степени. Поскольку речь идет об энергиях связанных (в веществе) электронов, все корни подобных уравнений действительны и отрицательны. Однако если

рассматривать абсолютные значения указанных энергий, т.е. потенциалы ионизаций, осуществляемых вырыванием электрона из соответствующих состояний, приходим к алгебраическому уравнению с действительными и положительными корнями, для которого выше была доказана сходимости последовательности приближений, генерированной иррациональной итерационной функцией. Коэффициенты характеристического уравнения a_i с точностью до множителя $(-1)^i$ совпадают с суммами всех главных миноров i -го порядка определителя матрицы Гамильтона. Поэтому когда дело касается больших молекул или кристаллов с элементарными ячейками, содержащими большое количество электронов, размеры матрицы велики и переход к характеристическому уравнению сопряжен с трудоемкими вычислениями его коэффициентов, после чего может возникнуть и проблема неустойчивости искомого значения корня алгебраического уравнения относительно погрешности этих расчетов. Так что в подобных случаях предпочтительнее прямое решение векового уравнения. Такой подход мы рассматривали ранее [3]. Однако если число электронов в молекуле или элементарной ячейке кристалла невелико, предвычисление коэффициентов характеристического уравнения с необходимой точностью вполне осуществимо. С целью сравнения сначала этим методом проанализируем ту же задачу, что и в работе [3] – определение квазиклассического энергетического спектра электронной системы молекулы дибора B_2 . Она вызывает интерес еще по одной причине. В начальном квазиклассическом приближении матричные элементы матрицы Гамильтона выражаются линейными комбинациями объемов областей пересечения троек сфер [4], радиусы которых совпадают с радиусами классических точек поворота для пары перекрывающихся электронных орбиталей и одного из орбиталей, создающего потенциал атома [5]. Это может привести к дополнительному аннулированию тех малых матричных элементов, которые обусловлены перекрыванием экспоненциально затухающих “хвостов” электронных орбиталей в классически запрещенной для них области. Благодаря данному эффекту наибольший корень характеристического уравнения, определяющего квазиклассические потенциалы ионизации молекулы дибора, оказывается кратным. Так что, на этом примере может быть проверена и способность разработанного метода итерационного решения определять наибольший корень алгебраического уравнения с действительными и положительными корнями вне зависимости от его кратности. Характеристическое уравнение 4-й степени для квазиклассических потенциалов ионизации внутренних электронных оболочек молекулы дибора имеет вид (квазиклассические параметры атомов бора, необходимые при вычислении коэффициентов подобных уравнений для борсодержащих систем, см., например, в [6]):

$$z^4 - 18.8265z^3 + 93.9381z^2 - 50.0321z + 5.9220 = 0.$$

Здесь коэффициенты приводятся в атомных единицах при сохранении четырех десятичных знаков, что необходимо для достижения характерной точности задания расстояния между центрами пары атомов бора, которое служит исходным параметром, лимитирующим точность расчетов электронного энергетического спектра диатомической молекулы. Если взять в качестве начального приближения $z_4^{[0]} = 18.8265$, то с помощью итерационной функции

$$\varphi_4(z) = (18.8265z^3 - 93.9381z^2 + 50.0321z - 5.9220)^{1/4}$$

наибольший корень этого уравнения (т.е. потенциал ионизации основного состояния электронной системы молекулы дибора) с указанной точностью находится равным $z_4 = 9.1203$, что совпадает с результатом прямого итерационного решения эквивалентного векового уравнения, хотя для достижения этого значения потребовались сотни итераций. Причина в том, что определяемый корень кратный и, следовательно, производная итерационной функции в его окрестности ненамного меньше 1. Для абсолютных значений энергий электронов в центре первой зоны Бриллюэна для двух верхних валентных зон и двух нижних зон проводимости в кубическом кристалле нитрида бора $c - BN$ в квазиклассическом приближении также получается алгебраическое уравнение 4-й степени [7]:

$$z^4 - 20.75z^3 + 102.71z^2 - 106.37z + 97.37 = 0.$$

При выборе начального приближения $z_4^{[0]} = 20.75$ посредством итерационной функции

$$\varphi_4(z) = (20.75z^3 - 102.71z^2 + 106.37z - 97.37)^{1/4}$$

для наибольшего корня (глубины залегания нижней точки валентной зоны $c - BN$) с точностью до четырех значащих цифр, что в данном случае достаточно, получаем $z_4 = 13.85$. Поскольку в этом примере наибольший корень был простым, для этого понадобились десятки итераций.

4. Обобщение иррациональной итерационной функции на случаи комплексной неизвестной. Доказательство сходимости к наибольшему по модулю корню алгебраического уравнения той последовательности приближений, которая генерируется итерационной функцией наиболее простой иррациональной формы, было дано при условии, что все корни действительны и положительны. Такую итерационную процедуру возможно непосредственно распространить и на те алгебраические уравнения, корни которых отличны от нуля и в комплексной плоскости лежат на одном и том же луче, исходящем из нулевой точки: чтобы подобное уравнение, записанное относительно комплексной неизвестной, превратить в алгебраическое уравнение с действительными положительными корнями, достаточно эту плоскость повернуть на угол, равный аргументу любого из корней. Важным, с точки зрения практических приложений, частным случаем подобного рода является алгебраическое уравнение с действительными отрицательными корнями (см. выше). Но, по-видимому, иррациональные итерационные функции допускают и более широкое применение: комплексные иррациональные итерационные функции, аналогичные действительной (2.11), могут пригодиться для поиска решений канонического алгебраического уравнения общего вида с отличными от нуля комплексными корнями. Оставляя открытым вопрос доказательства высказанной гипотезы, заметим, что в этом случае взамен единственной действительной иррациональной итерационной функции можно построить n комплексных, которые являются ветвями многозначной функции, сопоставляемыми с различными значениями аргумента корня n -й степени:

$$\varphi_{n(k)}(z) = (-a_1 z^{n-1} - a_2 z^{n-2} - \dots - a_n)^{1/n}_{(k)}, \quad (k) = 0, 1, 2, \dots, n. \quad (4.1)$$

С расширением области поиска корней алгебраического уравнения до множества комплексных чисел отпадает необходимость наложения какого-либо ограничения

на выражение под радикалом и поэтому начальное приближение можно выбирать произвольным образом. Кажется удобным, для этой цели использовать нулевую точку, $z_{n(k)}^{[0]} = 0$, так как ввиду неопределенности аргумента она годится для всех иррациональных итерационных функций.

Рис. 1. Ломаные линии, соединяющие на комплексной плоскости значения членов последовательностей, генерированных комплексными иррациональными итерационными функциями $\varphi_{2(k)}(z) = (3z - 2)^{1/2}_{(k)}$: $(k) = 1$ на левой полуплоскости; $(k) = 2$ на правой полуплоскости.

Особенности подобного обобщения иррациональной итерационной функции для случая комплексного алгебраического уравнения наглядно иллюстрируются результатами численного эксперимента на простом примере квадратного уравнения $z^2 - 3z + 2 = 0$. Оно обладает лишь действительными положительными корнями $z_1 = 1$ и $z_2 = 2$. Тем не менее, решение попытаемся найти с помощью двух комплексных итерационных функций $\varphi_{2(k)}(z) = (3z - 2)^{1/2}_{(k)}$, $(k) = 1, 2$. Для начального приближения $z_{2(k)}^{[0]} = 0$ первая из них, действующая в левой полуплоскости, где у уравнения корни отсутствуют, генерирует последовательность, которая по модулю сходится к $3\sqrt{5}/2$. Однако ее члены с нечетными и четными индексами образуют две подпоследовательности, которые сходятся к разным пределам: соответственно к $-3/2 - 3i$ и $-3/2 + 3i$. Отметим, что модули сумм этих пределов и корней уравнения совпадают: $|z_1 + z_2| = 3$. Вторая итерационная функция действует в правой полуплоскости, где у рассматриваемого уравнения корни имеются, и поэтому она генерирует такую последовательность, которая сходится к наибольшему по модулю корню: несмотря на то, что начальная точка и оба корня лежат на действительной оси, благодаря выходу в комплексную плоскость последовательность приближений обходит малый по модулю корень ($z_1 = 1$) и стремится к большому ($z_2 = 2$). Для наглядности «траектории», описываемые на комплексной плоскости указанными последовательностями, на рис. 1 изображены ломаными линиями.

СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Б. Л. Ван дер Варден, *Алгебра*, Наука, М., 1979.
- [2] Дж. Трауб, *Итерационные методы решения уравнений*, Мир, М., 1985.

- [3] Л. С. Чхартишвили, “Итерационное решение векового уравнения”, *Матем. заметки*, **77**:2 (2005), 303–310.
- [4] Л. С. Чхартишвили, “Объем области пересечения трех сфер”, *Матем. заметки*, **69**:3 (2001), 466–476.
- [5] Л. Чхартишвили, *Квазиклассическая теория основного состояния вещества*, Техн. ун-т, Тбилиси, 2004.
- [6] Л. С. Чхартишвили, “Квазиклассические оценки постоянной решетки и ширины запрещенной зоны кристалла: двумерный нитрид бора”, *ФТТ*, **46**:11 (2004), 2056–2063.
- [7] L. Chkhartishvili, “Quasi-classical approach: Electronic structure of cubic boron nitride crystals”, *J. Solid State Chem.*, **177**:2 (2004), 395–399.

Л. С. Чхартишвили

Грузинский технический университет, г. Тбилиси

E-mail: chkharti2003@yahoo.com

Поступило

15.01.2012