

Padé 展開は本当に有用なのか

電通大情報工 浜田 穂積 (HAMADA, Hozumi)

十分滑らかな 1 変数の関数 (解析関数のようなもの) を考える. Taylor 展開は関数の近似にとって重要な役割を果たす. 十分長い展開の打切りは, 近似式の基本をなすものである. これは多項式となり, その計算法は Horner 法によるのが望ましい. すなわち, n 次の多項式

$$g(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n$$

を

$$z_n = a_n, \quad z_i = x \times z_{i+1} + a_i \\ i = n-1, \dots, 1, 0$$

により, 最終結果 $g(x) = z_0$ は, n 回の加減算と n 回の乗算で計算できる. しかも好都合なことに, 現実の (勝手に係数を定めた関数でなく), 近似値を計算したい関数では, 上式右辺の項の間に

$$|x \times z_{i+1}| \ll |a_i|$$

と言う関係が成り立つので, z_i の誤差はほとんど a_i で, すなわち $g(x)$ の誤差はほとんど a_0 の誤差で評価できる.

一方, 関数によって Taylor 展開の打切りでは誤差を十分に小にできない場合, Padé 展開を用いることがよくある. あらかじめ分子, 分母となる次の多項式 $P(x)$, $Q(x)$ の次数のみを定めて, 元の関数 $f(x)$ との間に, $P(x)/Q(x) - f(x)$ になるべく高次の項のみが残るように, $k+m+2$ 個の係数 $p_0, p_1, \dots, p_k, q_0, q_1, \dots, q_m$ を定める.

$$P(x) = p_0 + p_1x + \cdots + p_kx^k$$

$$Q(x) = q_0 + q_1x + \cdots + q_mx^m$$

この有理式 $P(x)/Q(x)$ を Padé 展開という. ただし, 分子, 分母を同じ値で除しても $P(x)/Q(x)$ の値は変わらないことから, これらの係数の内の一つ $q_0=1$ と定める. すなわち $k+m+1$ 個の係数を定めることになる. $P(x)$, $Q(x)$ の計算には, 上と同じく Horner 法によると, $P(x)$ の計算に k 回の加減算と k 回の乗算, $Q(x)$ の計算に m 回の加減算と m 回の乗算を必要とする. ただし $p_k=1$ あるいは $q_m=1$ と調整すれば, 乗算を 1 回減らすことができる. これを適用して, $P(x)/Q(x)$ の計算には $k+m$ 回の加減算と, $k+m$ 回の乗除算を必要とする (ただし除算は 1 回と決まっている) ので, $k+m$ をこの展開の広義の次数と考えることができる. ここで $m=0$ の場合には, この Padé 展開は実質的に多項式となり, 多項式による近似式は Padé 展開に含まれると考えられている. 多項式と同様に, 有理式の最良近似式を計算することが多いが, 上のことから, 有理式の最良近似式の計算を用いて多項式の最良近似式を行なう方法をとることが多いようである. 有理式は, 同じ次数 n でも, 分子 n 次, 分母 0 次の多項式から, 分子 0 次, 分母 n 次の多項式の逆数まで, 全部で $n+1$ 通りあり, 多くの形から選べる点が良いと思われる.

ところで近似値の計算には, 古来連分数が用いられていて, これを関数にまで拡張したものが, 我々の馴染みのある関数にも多くその展開形が知られている. これも多項式と同

じく計算法の観点で述べると、次の通りである。形は色々有り得るが、とりあえず次の形とする。

$$g(x) = a_0 + \frac{x}{a_1 + \frac{x}{a_2 + \frac{x}{a_3 + \dots + a_n}}}$$

これを次の方法で計算すると、多項式と類似する。これも Horner 法と呼ぼう。

$$z_n = a_n, \quad z_i = x \div z_{i+1} + a_i \\ i = n-1, \dots, 1, 0$$

最終結果 $g(x) = z_0$ は、 n 回の加減算と n 回の除算で計算できる。誤差に関して、やはり多項式と同様の好都合な条件となる。連分数の計算は別法がよく知られているが、誤差の点でやはり Horner 法が優れている。上述の連分数の打ち切りを広義 n 次式と呼ぶことにすれば、 n 次の多項式、連分数、有理式はいずれも被近似関数との残差の order が同じであり、かつ n 回の加減算と n 回の乗除算を要するとまとめることができるが、これは十分納得できることである。ただし、連分数は 1 通りの形しかないこと、および近似値の計算では除算を多く必要とすることが欠点である。そこで多項式と連分数の計算法の類似性に着目し、両者を混合する。すなわち、 $i = n-1, \dots, 1, 0$ において $z_i = x \times z_{i+1} + a_i$ と $z_i = x \div z_{i+1} + a_i$ の何れを用いても良いことにしよう。こうすると可能な組合せは 2^n 通りと、飛躍的に増加する。これらの式の中には等価なものもあるので、これを取除いた本質的に異なるものの個数 $M(n)$ は、 $M(0) = 1$, $M(1) = 2$, 以下 $M(n) = M(n-1) + M(n-2)$ であることはすでに報告した通りである。これにより先の欠点の内、式の形の個数はむしろ有理式より多くなり、除算の回数も半分以上に減らせることも分っている。もちろん n 次の有理式 $n+1$ 通りはすべて $M(n)$

通りの中に含まれる。

上で述べた混合展開形は、単に多項式と連分数の形式的な類似性を無理に引出したものでは決してない。その理由は次の通りである。関数 $f(x)$ が原点で極あるいは零点である場合、その位数の因子を取除いたものを $f_0(x)$ とし、 $0 < |f_0(0)| < \infty$ となるように調整しておく。このとき、帰納的に $i=0, 1, 2, \dots$ について次の関係によって $f_{i+1}(x)$ を定義する。

$$f_i(x) = a_i + x \cdot f_{i+1}(x)$$

あるいは $1/f_i(x) = a_i + x \cdot f_{i+1}(x)$

これは極く自然な定義である。すべて第一の方をとるとき多項式となり、すべて第二の方をとるとき連分数となる。連分数の方は先にあげた例とは異なるが、なじみのある関数の連分数展開形はむしろこちらの形をとるものが多い。

次は Padé 展開の不自然な点である。

- (1) 無限展開形を打ち切ったものでない。次数を定める毎に展開形を求める必要がある。
- (2) 分子 (あるいは分母) の次数だけを 1 増加 (減少) させると係数がすべて変化する。次は有理関数系近似式の欠点である。
- (3) 近似値の計算において、分子、分母それぞれの丸め誤差が加わり、最終的に 2 倍になる。
- (4) 乗算が 1 回多くなる。それを避けようにも、分子、分母の値域を選べないので、特に 16 進計算機の場合、誤差が大になる。さらに、最も精度を要しない係数で高精度の係数正規化するという矛盾がある。
- (5) 有理関数系の近似式の係数を計算するには、多大な計算精度を必要とする。

よって、Padé 展開を用いないで、混合展開を用いる方が、理論的に優れている。