

3変数以上からなる多変数多項式の Padé 近似と 偏微分方程式への適応

筑波大学医学医療系

筑波大学附属病院総合臨床教育センター

讃岐 勝

Masaru Sanuki

Faculty of Medicine, University of Tsukuba

Center for Medical Education and Training, University of Tsukuba Hospital

e-mail: sanuki@md.tsukuba.ac.jp

概要

本稿では、多変数の打ち切りべき級数（多項式）の Padé 近似の算法におよびその応用として偏微分方程式への適応を考える．主に 3 変数以上を持つ場合に適応可能かについて考察する．

1 はじめに

本稿では、多変数の打ち切りべき級数（多項式）の Padé 近似（有理関数近似）における既存の研究を振り返り、その中であまり熟慮されていない 3 変数以上の場合について述べる．ゴールとして偏微分方程式への適応を目指しているが、本稿ではアイデアのみ述べる．

1 変数の打ち切りべき級数（多項式）の Padé 近似に関して、算法がほぼ確立されており数値的に如何に安定に展開するかの問題になる．実際には入力される級数（多項式）の数係数からなる行列の行列式を展開することで得られる．それらは、常微分方程式の数値解法・近似 GCD の計算へ利用がされている．

一方、多変数の打ち切りべき級数（多項式）の Padé 近似に関して、Cuyt[Cuyt1983] が 1 変数の場合とほぼ同様に解けることを論文の中で示しており、その結果は解析分野などで引用されている [Cuyt1985]．また数値解析の分野では、偏微分方程式の級数による数値解法へ利用されているが 2 変数の場合に限られている Ayaz[Ayaz2003], Turut-Çelik-Yigider[TCY2010]．2 変数にのみ利用が限られるのは、偏微分方程式を級数に書き換える際に非常に複雑な式になってしまうことに加え Padé 近似を実行するために利用される行列の要素が多項式になってしまうため、行列式の展開が困難になることが考えられる．多変数に関しては他の方法について、あまり考慮されていない．

以上の現状から、Padé 近似について始めから振り返り、先行研究について紹介することで、式が複雑な場合にも耐えうる算法について提案する．また、偏微分方程式の級数への変換ルールを確認することで、変数が多い場合に関して偏微分方程式の数値解法のアルゴリズムについて整理することにする．

まず、2 変数の場合について見る．

例 1 (Turut-Çelik-Yigider[TCY2010]). 次の偏微分方程式を解く.

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - 3 \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} + \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= 0, \\ u(x, 0) &= x^2 \\ \frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) &= e^x.\end{aligned}$$

Two-dimensional differential transform method (DTM) [] を適用すると, 方程式は次のように書き直せる.

$$(k+1)(k+2)U(k+2, h) - 3(k+1)(h+1)U(k+1, h+1) - 4(k+1)(k+2)U(k+2, h) = 0.$$

ここで, $U(k, h)$ は解析解 $u(x, t)$ の x^{kth} の係数に対応する. 得られた関係式に値をそれぞれ代入すると,

$$\begin{aligned}U(0, 0) &= 1, U(1, 0) = 0, U(2, 0) = 0, U(3, 0) = 0, \\ U(0, 1) &= 1, U(1, 1) = 1, U(2, 1) = \frac{1}{2}, U(n, 1) = \frac{2}{n!} \text{ for } n \geq 3.\end{aligned}$$

上から次が得られる.

$$U(0, 2) = -\frac{1}{8}, U(0, 3) = \frac{13}{96}.$$

以上から, 与えられた偏微分方程式は次のように変換される.

$$u^*(x, t) = t - \frac{1}{8}t^2 + x^2 + tx + \frac{1}{2}tx^2 + \frac{13}{96}t^3 + \dots$$

これを数値で評価するために分子の次数 2、分母の次数 3 の Padé 近似 (有理関数近似) を行う. 分子 $p(x, t)$ は次の行列式で表現される (分母 $q(x, t)$ は次の行列式において 1 列目の各要素がそれぞれ 1 と入れ替えたもの).

$$\begin{vmatrix} t - \frac{1}{8}t^2 + x^2 + tx + \frac{1}{2}tx^2 + \frac{13}{96}t^3 & t + x^2 + tx - \frac{1}{8}t^2 & t \\ \frac{1}{6}tx^3 - \frac{3}{16}t^2x^2 + \frac{13}{96}t^3x - \frac{17}{512}t^4 & \frac{1}{2}tx^2 - \frac{3}{8}t^2x + \frac{13}{96}t^3 & x^2 + tx - \frac{1}{8}t^2 \\ \frac{1}{24}tx^4 - \frac{1}{16}t^2x^3 + \frac{13}{192}t^3x^2 - \frac{17}{512}t^4x + \frac{41}{6144}t^5 & \frac{1}{6}tx^3 - \frac{3}{16}t^2x^2 + \frac{13}{96}t^3x - \frac{17}{512}t^4 & \frac{1}{2}tx^2 - \frac{3}{8}t^2x + \frac{13}{96}t^3 \end{vmatrix}.$$

上の式を展開することによって, 有理関数近似が終わり数値による評価が可能となる. $\square$

本稿では, 2 では, Padé 展開を改めて定義することにし, 元となるアイデアおよび既存算法について紹介する. 3 では, 3 変数以上を持つ偏微分方程式の解法について述べる. 4 では, 本稿をまとめる.

本稿では次の記号を用いる. $\mathbb{F}$ は浮動小数係数全体の集合とし, $\mathbb{F}[x, \mathbf{u}] = \mathbb{F}[x, u_1, \dots, u_\ell]$ は主係数 x , 従変数 $u_1, \dots, u_\ell$ で構成される多変数多項式環, $\mathbb{F}\{\mathbf{u}\}[x]$ は係数に $\mathbb{F}\{\mathbf{u}\}$ 上の多項式を持つ変数 x の形式的べき級数をそれぞれ表す. $F(x, \mathbf{u}) \in \mathbb{F}[x, \mathbf{u}]$ について, $F(x, \mathbf{u}) = f_d(\mathbf{u})x^d + f_{d-1}(\mathbf{u})x^{d-1} + \dots + f_0(\mathbf{u})$ と x の多項式として表現, また, 従変数 $\mathbf{u}$ の全次数ごとに $F = F^{(0)}(x) + \delta F^{(1)}(x, \mathbf{u}) + \delta F^{(2)}(x, \mathbf{u}) \dots$ と表現する.

2 Padé近似

この章では、Padé 近似の定義から始めて行列式の導入および Cuyt による ε -algorithm について紹介する [Cuyt1982].

定義 1 (1 変数多項式の Padé 近似). $F(x) = f_0 + f_1x + f_2x^2 + \dots \in \mathbb{F}\{x\}$ に対して, 位数 (m, n) の Padé 近似とは分母の次数 m の多項式 P と分子の次数 n の多項式 Q によって表現される有理式近似のことであり, 次をみtas.

$$\frac{P}{Q} = F + O(x^{m+n+1}) \quad \text{or} \quad P = QF + O(x^{m+n+1}).$$

□

定義 2 (多変数多項式の Padé 近似). $F(x, \mathbf{u}) = f_0(\mathbf{u}) + f_1(\mathbf{u})x + f_2(\mathbf{u})x^2 + \dots \in \mathbb{F}[\mathbf{u}]\{x\}$ に対して, 位数 (m, n) の Padé 近似とは分母の次数 m の多項式 P , 分子の次数 n の多項式 Q によって表現される有理式近似のことであり, 次をみtas.

$$\frac{P}{Q} = F \pmod{\langle x^{m+n+1} \rangle}.$$

□

2.1 式の導出：連立方程式に帰着

$F = f_0 + f_1x + f_2x^2 + \dots$ の位数 (m, n) の Padé 近似は次の手順で計算される.

$F = \frac{P}{Q} + O(x^{m+n+1})$ をみtas $P = p_0 + p_1x + p_2x^2 + \dots$ および $Q = q_0 + q_1x + q_2x^2 + \dots$ を求めるため, $FQ = P \pmod{x^{m+n+1}}$ を展開し x^i の係数を比較することによって次の関係式を得る. ただし, $q_0 = 1$ と固定することによって $p_0 = f_0$ がわかる.

$$\begin{aligned} p_1 &= 1 \cdot f_1 + q_1 f_0, \\ p_2 &= 1 \cdot f_2 + q_1 f_1 + q_2 f_0, \\ &\vdots \\ p_m &= 1 \cdot f_m + q_1 f_{m-1} + \dots + q_m f_0, \\ 0 &= 1 \cdot f_{m+1} + q_1 f_m + \dots + q_{m+1} f_1, \\ &\vdots \\ 0 &= 1 \cdot f_{m+n} + q_1 f_{m+n-1} + \dots. \end{aligned}$$

すなわち, $(m+n)$ 次の連立方程式が得られる:

$$\left(\begin{array}{c|cccc} 1 & f_0 & 0 & \cdots & 0 \\ & f_1 & f_0 & & \\ & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ & f_{m-1} & f_{m-2} & \cdots & \cdots \\ \hline & f_m & f_{m-1} & & \\ & f_{m+1} & \cdots & \cdots & \cdots \\ & \vdots & \vdots & \cdots & \cdots \\ & f_{m+n-1} & f_{m+n-2} & \cdots & \cdots \end{array} \right) \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_m \\ q_1 \\ q_2 \\ \vdots \\ q_n \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_m \\ f_{m+1} \\ f_{m+2} \\ \vdots \\ f_{m+n} \end{pmatrix}. \quad (1)$$

2.2 行列式による方法

式 (1) を変形することによって分子、分母は次の行列式によって表される。

$$P = \begin{vmatrix} F_m & F_{m-1} & \cdots & F_{m-n} \\ f_{m+1}x^{m+1} & f_mx^m & \cdots & f_{m-n+1}x^{m-n+1} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ f_{m+n}x^{m+1} & f_{m+n-1}x^m & \cdots & f_mx^m \end{vmatrix}, \quad (2)$$

$$Q = \begin{vmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ f_{m+1}x^{m+1} & f_mx^m & \cdots & f_{m-n+1}x^{m-n+1} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ f_{m+n}x^{m+1} & f_{m+n-1}x^m & \cdots & f_mx^m \end{vmatrix}, \quad (3)$$

ただし, $F_k = \sum_{i=0}^k f_i(\mathbf{u})x^i \in \mathbb{F}[x, \mathbf{u}]$ である。

2.3 ε -algorithm

i と j が走る関数 $\varepsilon_j^{(i)}$ は次の漸化式で構成される関数とする。

$$\varepsilon_{j+1}^{(i)} = \varepsilon_{j-1}^{(i+1)} + \frac{1}{\varepsilon_j^{(i+1)} - \varepsilon_j^{(i)}}, \quad \varepsilon_{-1}^{(i)} = 0, \quad \varepsilon_0^{(i)} = F_i.$$

ここで, $\varepsilon_0^{(i)} = F_i$ は入力されたべき級数の係数からなる多項式である。

命題 1 (ε -algorithm [Cuyt1982]). $\varepsilon_{(2m)}^{(m-n)}$ は位数 (m, n) の Padé 近似に等しい。 □

例 2 (位数 $(m, n) = (2, 3)$ における実行例 (途中より計算省略)).

$$\begin{aligned} \varepsilon_4^{(3-2)} &= \varepsilon_2^{(2)} + \frac{1}{\varepsilon_3^{(2)} - \varepsilon_3^{(1)}} \\ &= \varepsilon_0^{(3)} + \frac{1}{\varepsilon_1^{(3)} - \varepsilon_1^{(2)}} + \frac{1}{\varepsilon_3^{(2)} - \varepsilon_3^{(1)}} \\ &= F_3 + \frac{1}{\varepsilon_{-1}^{(4)} + \frac{1}{\varepsilon_0^{(4)} + \varepsilon_0^{(3)}} - \varepsilon_{-1}^{(3)} + \frac{1}{\varepsilon_0^{(3)} + \varepsilon_0^{(2)}}} + \frac{1}{\varepsilon_3^{(2)} - \varepsilon_3^{(1)}} \\ &= \cdots \end{aligned}$$

2.4 リフティングによる構成

$P(x, \mathbf{u}) = p(x) + \delta P^{(1)}(x, \mathbf{u}) + \cdots$ と $Q(x, \mathbf{u}) = q(x) + \delta Q^{(1)}(x, \mathbf{u}) + \cdots$ について, $p(x)$ と $q(x)$ が互いに素である場合, 次の方法によって構成可能である。

$w = 0$ のとき, $F \equiv \frac{p(x)}{q(x)} + O(x^{m+n+1}) \pmod{\mathbf{u}}$ をみたら $p(x)$ と $q(x)$ は仮定より既に得られている。

$w = 1$ のとき, $\delta P^{(1)}$ と $\delta Q^{(1)}$ は次式をみたら。

$$F \equiv \frac{p(x) + \delta P^{(1)}}{q(x) + \delta Q^{(1)}} \pmod{\langle x, \mathbf{u}^2 \rangle}$$

$q(x) + \delta Q^{(1)}$ を両辺にかけると,

$$(f(x) + \delta F^{(1)})(q(x) + \delta Q^{(1)}) \equiv p(x) + \delta P^{(1)} \pmod{x^{m+n+1}}$$

全次数 1 の項をまとめると,

$$f(x)\delta Q^{(1)} + q(x)\delta F^{(1)} \equiv \delta P^{(1)} \pmod{x^{m+n+1}}.$$

さらに両辺に $q(x)$ をかけて整理すると, 次の関係式を得る.

$$-p(x)\delta Q^{(1)} + q(x)\delta P^{(1)} \equiv q(x)^2\delta F^{(1)}. \quad (4)$$

$-p(x)$ と $q(x)$ は互いに素なので,

- $i < m+n$ に対して $A_i(-p(x)) + B_i q(x) = x^i$ を満たす A_i と B_i が一意に定まる (拡張 Euclid の互除法).
- $i = m+n$ に対しては, 一意に決定はしないが決定はする.

全次数 $w-1$ まで構成されたと仮定する.

$$F(x, u) \equiv \frac{p(x) + \delta P^{(1)} + \dots + \delta P^{(w-1)}}{q(x) + \delta Q^{(1)} + \dots + \delta Q^{(w-1)}} + \pmod{\langle x^{m+n+1}, u^w \rangle}$$

このとき,

$$F(x, u) \equiv \frac{p(x) + \delta P^{(1)} + \dots + \delta P^{(w-1)} + \delta P^{(w)}}{q(x) + \delta Q^{(1)} + \dots + \delta Q^{(w-1)} + \delta Q^{(w)}} + \pmod{\langle x^{m+n+1}, u^{w+1} \rangle}$$

から次を得る.

$$-p(x)\delta Q^w + q(x)\delta P^{(w)} \equiv q(x) \left(q(x)\delta F^{(w)} + \sum_{i=1}^w \delta Q^{(i)} \delta F^{(w-i)} \right) \pmod{x^{m+n+1}}.$$

ゆえに, 拡張互除法により得られる A_i と B_i を用いることによって, $\delta P^{(w)}$ と $\delta Q^{(w)}$ が決定する.

注意 1 (単元による影響). 拡張互除法において, $i = m+n$ まで計算しているため得られた結果には単元の不定性が発生するように思われる. しかし, Hensel 構成の場合と異なり, $F \equiv \frac{P}{Q} \Rightarrow$

$F \equiv \frac{uP}{uQ}$ が成立するので, 単元の不定性は結果に影響しない. $\square$

2.5 算法の比較

先に紹介した, 連立方程式による方法, 行列式を利用する方法, ε -algorithm, リフティング法が変数が多くなった場合にどのように振る舞うか考察する. 振る舞いの様子は Padé 近似の計算に直接関係する.

ε -algorithm は, 入力された多項式の係数を分母に持つ式を再帰的に利用して計算を行う. 多変数多項式の場合, 係数も多項式であり ε -algorithm は有理式の加算を再帰的に行うことになり, 数式膨張がすぐにおきる. このため, 多変数 Padé 近似に向かないことがわかる.

行列式を用いる方法について、多変数のべき級数を Padé 近似するためには多項式を要素にもつ行列式を展開する必要がある。行列式のサイズ $(m+n)$ が小さい場合は計算可能であるが、サイズが大きい場合には数式膨張を起こすため上と同様に多変数 Padé 近似に向かない。

リフティングによる方法は、拡張互除法が計算できるかに依存する。QR 法を利用すれば安定して計算できることが知られているので [CWZ04]、次数が大きな場合についても適応可能であることが想像できる。ただし、Hensel 構成を考えると大きな次数の場合には誤差が積もるため位数 m, n が大きな場合には適応するのは難しく小さなサイズの場合に限られる。

線形方程式を方法について、多変数 Padé を実行するためには数式を要素に持つ連立方程式を解く必要がある。難しいように思えるが、讃岐により効率的に計算する方法が提案されており、数値的な誤差の見積り [Sanuki2009] および精度の改善する方法 [讃岐 2013] についてなど数値的に計算する場合の安定化について保証されている。

3 偏微分方程式への適応

偏微分方程式を級数に書き換えることが可能であれば、Padé 近似により数値的に安定した数値評価が行うことができる。変換するルールは Zhou[Zhou1986] によって既に知られており、DTM(dimentional transform method) と呼ばれる。Taylor 展開によって関係式は得られるため変換式を得るのは難しくない。

次は実際の変換ルールの一部である。

Original function $w(x, y, t)$	Transformed function $W(k, h, m)$
$u(x, y, t) \pm v(x, y, t)$	$U(k, h, m) \pm V(k, h, m)$
$c \times u(x, y, t)$	$c \times U(k, h, m)$
$\frac{\partial^{r+s+p} u(x, y, t)}{\partial x^r \partial y^s \partial t^p}$	$\frac{(k+r)!}{k!} \frac{(h+s)!}{s!} \frac{(m+p)!}{p!} \times U(k+r, h+s, m+p)$
$\frac{\partial u(x, y, t)}{\partial x} \frac{\partial v(x, y, t)}{\partial y}$	$\sum_{r=0}^k \sum_{s=0}^h \sum_{p=0}^m (k-r+1)(h-s+1) \times U(k-r+1, r, p) V(r, h-s+1, m-p)$
$u(x, y, t)v(x, y, t)$	$\sum_{r=0}^k \sum_{s=0}^h \sum_{p=0}^m U(r, h-s, m-p) V(k-r, s, p)$

上の式は多項式の関係式を係数比較した形になる。

以上から、偏微分方程式はべき級数の形に変換することが可能である。

4 まとめ

本稿では、多変数の打ち切りべき級数（多項式）の Padé 近似法について整理を行ったが、一番ベーシックな連立方程式を得く方法が変数が多くなるに連れて効率がよいことが確認できた。偏微分方程式の Padé 近似を利用した数値解法について、数式処理の分野ではあまり話題に上がることがないので、Padé 近似の算法とあわせて整理した。

計算速度について、実験を行うまでに至らなかったが比較実験については今後の課題とする。

参考文献

- [Ayaz2003] F. Ayaz. *On the two-dimensional differential transform method*. Appl. Math. Compu. **143**(2–3) 2003, 361–374.
- [BAA2012] M. Bakhshi, M. Asghari-Larimi and M. Asghari-Larimi. *Three-dimentional differential transform method for solving nonlinear three-dimensional Volterra integral equations*. J. Math. Comp. Sci., **4**(2) 2012, 246–256.
- [Cuyt1982] A. Cuyt. *The ε -algorithm and multivariate Padé approximants*. Numer. Math., **40** (1982), 39–46.
- [Cuyt1983] A. Cuyt. *Multivariate Padé-approximant*. J. Math. Anal. Appl., **96** 1983, 283–293.
- [Cuyt1985] A. Cuyt. *A Montessus de Ballore theorem for multivariate Padé approximants*. J. Approx. Theory, **43** 1985, 43–52.
- [Jang] B. Jang. *Basic ideas of differential transform method*. Preprint, and it can be downloaded at <http://amath.unist.ac.kr/upload/idea%20of%20the%20differential%20transform%20method.pdf> (2014.2).
- [JAT2010] H. Jafari, M. Alipour and H. Tajadodi. *Two-dimensional differential transform method for solving nonlinear partial differential equations*. IJRRAS (International Journal of Research and Reviews in Applied Sciences), **2**(1) 2010, 47–52.
- [Sanuki2009] M. Sanuki. *Computing multivariate approximate GCD based on Barnett's theorem*. Proc. of SNC 2009, 2009, 149–157.
- [讃岐 2013] 讃岐勝. *Jacobi法を基にした多項式要素の線形方程式の解法*, 第42回数値解析シンポジウム講演予稿集, 2013, 144–147
- [TG2013] V. Turut and N. Güzel. *On solving partial differential equations of fractional order by using the variational iteration method and multivariate Padé approximations*. EJPAM (European Journal of Pure and Applied Mathematics), **6**(2) 2013, 147–171.
- [TCY2010] V. Turut, E. Çelik and M. Yiğider. *Multivariate padé approximataion for solving differential equations (PDE)*, Int. J. Numer. Meth. Fluids 2011, 2011, **68**, 1159–1173,
- [Zhou1986] J. K. . Zhou. *Differential transformation adn its application for electrical circuits*. Huazhong University press, China, 1986 (in Chinese).
- [CWZ04] R. Corless, S. Watt and L. Zhi. *QR factoring to compute the GCD of univariate approximate polynomials*. IEEE Trans. Signal Proces., **52**(12) (2004), 3394–3402.