

8.

近似的 GCD と Padé 近似の関係

甲斐 博 (愛媛大工)

野田 松太郎 (ノ)

Abstract. Here we show an theoretical error bound of Hybrid Rational Function Approximation (HRFA) using a study of the asymptotic behavior of Padé approximation. In HRFA, an approximate GCD of numerator and denominator polynomials of a rational function is computed. Then the continued fraction which remove the approximate GCD is computed by using the polynomial remainder sequence of approximate GCD algorithm. We show the continued fraction is equal to the Padé approximation of given rational function.

8.1 はじめに

我々はすでに近似的 GCD [1] を用いた有理関数近似の技法を提案し [3]、その有用性について議論している。これをハイブリッド有理関数近似という。有理関数近似は、多項式近似に次いで簡単な近似法であり、かつ特異点をもつ関数の近似にも適用できる。このような利点を持つにもかかわらず、有理関数近似の幅広い利用の障壁となっていた問題点は、近似有理関数の既約性にあった。有用な定理の多くは既約な有理関数を対象としているが [4][5]、係数が浮動小数の場合には有理関数の既約性に関してはほとんど何もいえないことを文献 [3] で述べた。我々の考え方は、分子・分母の浮動小数係数多項式の近似的共通因子を求め、これによって有理関数を近似的に既約なものにする点にあった。

本論では、近似的 GCD 算法を用いて Padé 近似を求める方法を示す。さらに Padé 近似の収束の議論を用いる事により、誤差の評価を試みる。

8.2 ハイブリッド有理関数近似

関数 $f(x)$ の実数区間 $[a, b]$ での有理関数補間は次のようにして求める。有限個の離散点列 $x_0 = a < x_1 < \dots < x_M = b$ を与え、対応する関数値 $f_i = f(x_i)$, $i = 0, \dots, M$, を計算する。結局、 (x_i, f_i) の有限個の組を与えるので、関数値を実験データなどに置き換えても支障はない。これらの点列を正確に通る有理関数

$$r_{m,n} = \frac{N_m}{D_n} = \frac{\sum_{j=0}^m a_j x^j}{\sum_{j=0}^n b_j x^j}$$

を決定する。この有理関数を (m, n) 有理関数と呼び、便宜上 $b_0 = 1$ と規格化する。多項式の係数 a_j, b_j は一般に浮動小数であり、ガウス消去法により簡単に求め得る。しかし結果として得られる有理関数は、区間内で連続であるとはいえず、むしろ一般に分母の零点の存在により特異になる。係数が整数なら、分子と分母の GCD を計算することにより、特異性を除き、有理関数を既約にすることができる。一方、係数が浮動小数の場合は、従来からの手法のみではこのような処理は不可能で、有理関数近似はあまり実用的な手法とはなりにくかった。しかし、浮動小数係数を持つ 2 つの多項式間の共通因子を求めるための近似的 GCD 算法 [1] を用いると、整数係数の場合のように有理関数を既約に（但し、近似的に）し得る可能性がある。これをハイブリッド有理関数近似（HRFA: Hybrid Rational Function Approximation）と呼ぶ。HRFA は以下のようにまとめられる。

アルゴリズム ハイブリッド有理関数近似（HRFA）

入力 : 有限個の点 $x_0, x_1, \dots, x_M$ と対応する $f_i = f(x_i)$, $i = 0, \dots, M$,

近似的 GCD のための cutoff 値 ϵ ($0 < \epsilon \ll 1$)

出力 : $(x_0, f_0), (x_1, f_1), \dots, (x_M, f_M)$ を近似する有理関数 $r(x) = N(x)/D(x)$

方法 :

1. 入力データを近似する (m, n) 有理関数

$$r_{m,n}^0(x) = \frac{N_m^0(x)}{D_n^0(x)} = \frac{\sum_{j=0}^m a_j x^j}{\sum_{j=0}^n b_j x^j}, \quad b_0 = 1$$

を求める。ただし、 $M = m + n + 1$

2. $N_m^0(x)$ と $D_n^0(x)$ の精度 ϵ の近似的 GCD $g(x)$ を求める。

$$g(x) = \text{ApxCSD}(N_m^0(x), D_n^0(x); \epsilon)$$

3. 近似的に既約な有理関数

$$r(x) = \frac{N_m(x)}{D_n(x)} = \frac{\frac{N_m^0(x)}{g(x)}}{\frac{D_n^0(x)}{g(x)}}$$

を求める。ただし、多項式の除算は商を求める計算を行う。

このような手法で求めた有理関数近似の有用性はハイブリッド積分への応用も含めて参考文献 [3][2] に詳しく述べた。

8.3 近似的 GCD を用いた Padé 近似

HRFA の有用性は、これまで実験的に求められているが、理論的な誤差評価の議論はなされていない。この目的のためには、HRFA と従来からの伝統的な有理関数近似技法との関係を示せると便利である。ここでは、古典的でかつ最も代表的な有理関数近似の一つである Padé 近似との関係を考察する。Padé 近似には誤差に関する確立した研究も多い。両者の関係を議論するために、まず、近似的 GCD 算法を用いて、有理関数の Padé 近似を得る方法を述べる。但し、ここでは有理関数の次数は分子と分母の次数が等しいと仮定する。まず、近似的 GCD 算法について説明する。与えられた 2 つの多項式 $N(x), D(x)$ の近似的 GCD は次の多項式剰余列 (PRS) $P_0, P_1, \dots, P_k \neq 0, P_{k+1} = 0$ (cutoff ϵ) を計算して求める。

$$\begin{aligned} Q_i &= \text{quo}(P_{i-1}/P_i) . \\ P_{i-1} &= Q_i P_i + \max\{1, \text{mmc}(Q_i)\} \times P_{i+1}, \quad i = 1, \dots, k . \end{aligned} \quad (1)$$

ここで、 $P_0 = N(x), P_1 = D(x)$ であり、 $\text{mmc}(Q_i)$ は多項式 $Q_i(x) = b_l x^l + \dots + b_0$ の最大係数 $\max\{|b_l|, \dots, |b_0|\}$ を表す。

Padé 近似と関係つけるために、はじめに $t = 1/x$ に変数変換を行う。つまり、

$$\hat{r}^0 = \frac{N^0(1/t)}{D^0(1/t)} \quad (2)$$

$$= \frac{\hat{N}^0(t)}{\hat{D}^0(t)} \quad (3)$$

とする。

$N(x)$ と $D(x)$ の近似的 GCD を求めるかわりに $\hat{N}^0$ と $\hat{D}^0$ に対し近似 GCD のアルゴリズムを適用する。すなわち、 $\text{ApxCDC}(\hat{N}^0, \hat{D}^0, \epsilon)$ を求め、この過程の PRS を用いて $\hat{r}^0(t)$ を連分数表示する。結果は、

$$\hat{r}^0(t) = Q_1 + \frac{m_1}{Q_2 + \frac{m_2}{Q_3 + \frac{m_3}{Q_4 + \dots + \frac{m_{k-1}}{Q_k + \frac{P_{k+1}}{P_k}}}}} . \quad (4)$$

となる。ただし、 $m_i = \text{mmc}(Q_i)$ である。ここで、cutoff ϵ の意味で $P_{k+1} = 0$ であるから、近似的 GCD $g(t) = P_k(t)$ を取り除く。結果の連分数を $\hat{r}(t)$ とすると、

$$\hat{r}(t) = Q_1 + \frac{m_1}{Q_2 + \frac{m_2}{Q_3 + \frac{m_3}{Q_4 + \dots + \frac{m_{k-1}}{Q_k}}}} . \quad (5)$$

すなわち、 $\hat{r}(t)$ を近似的 GCD を取り除いた連分数 $r(t)$ と定義する。ここで、Padé 近似が normal といわれる場合、 $Q_i, i = 2, \dots, k$ は一次の多項式になる。

以上のように、 $t = 1/x$ に変数変換すると無限遠点を原点とみなして連分数展開を行っていることになる。したがって、 x に変数を戻した $r(x)$ と $r^0(x)$ の誤差の評価は原点での Taylor 展開を用いて考えることができる。このように、近似除算を連分数展開に置き換えると、次の定理があることを示し得る。

定理 8.3.1. $r(x)$ を、(5) 式で与えられる $\hat{r}(t)$ を $x = 1/t$ と変数変換して得られた連分数とし、 $r^0(x)$ を (4) 式の連分数に同じ操作をほどこしたものとす。 $r(x)$ と $r^0(x)$ の $x = 0$ での Taylor 展開を各々、 $\sum_{i=0}^{\infty} d_i x^i, \sum_{i=0}^{\infty} c_i x^i$ とする。 $r^0(x)$ が normal の場合、 $d_i = c_i, i = 0, \dots, 2k$ である。

証明

$r^0(s)$ は分子と分母に $g = \text{ApxCDC}(N, D, \epsilon), \text{degree}(g) = n - k$ の近似的 GCD をもつと仮定する。 $P_n = 0$ まで PRS を連分数表現すると、次の式であらわされる。

$$\hat{r}^0(t) = Q_1 + \frac{m_1}{Q_2 + \frac{m_2}{Q_3 + \dots + \frac{m_{k-1}}{Q_k + \frac{m_k}{Q_{k+1} + \dots + \frac{m_{n-1}}{Q_n}}}}}$$

ここで、 $\hat{r}^0(t)$ が normal と仮定すると、 $Q_i = \alpha_i + \beta_i t$ とおける。 Q_i を代入し変数 x に逆変換する。

$$r^0(x) = \alpha_1 + \frac{m_1 x}{\alpha_2 x + \beta_2 + \frac{m_2 x^2}{\alpha_3 x + \beta_3 + \dots + \frac{m_{k-1} x^2}{\alpha_k x + \beta_k + \frac{m_k x^2}{\alpha_{k+1} x + \beta_{k+1} + \dots + \frac{m_{n-1} x^2}{\alpha_n x + \beta_n}}}}}$$

近似 GCD を取り除いた Q_k までの部分連分数 $r(x) = N_k(x)/D_k(x)$ と Q_{k+1} までの部分連分数 $C_{k+1}(x) = N_{k+1}(x)/D_{k+1}(x)$ の差は、連分数の理論より

$$C_{k+1}(x) - r(x) = (-1)^k \frac{x \prod_{i=1}^k (m_i x^2)}{D_{k+1}(x) D_k(x)},$$

である。したがって、

$$\frac{d^j}{dx^j} (C_{k+1}(x) - r(x))|_{x=0} = 0, \quad j = 0, \dots, 2k,$$

である。つまり、 $C_{k+1}(x)$ と $r(x)$ の $x = 0$ の Taylor 展開は 0 次から $2k$ 次の係数が一致する。これは $r^0(x)$ と $r(x)$ の関係でも成り立つ。 //

次の例によって定理を実際に示す。 $r^0(x)$ は 2 次の近似的共通因子を持つ。 2 次の近似的 GCD を取り除いた有理関数 r_1 と、 1 次の近似的 GCD を取り除いた有理関数 r_2 が得られる。

$$r^0(x) = \frac{(x + 3.001) * (x + 4) * (x + 5)}{(x + 5.01) * (x + 3) * (x + 6)}$$

$$\begin{aligned}
r_1(x) &= \frac{0.666 + 0.166x}{1.00 + 0.166x}, \\
r_2(x) &= \frac{0.666 + 0.361x + 0.0488x^2}{1.00 + 0.460x + 0.488x^2}.
\end{aligned}$$

以上あげた伝達関数の各々の Taylor 展開を $r^0(x)$ を含めて示すと、

$$\begin{aligned}
r^0(x) &= 0.66555777 + 5.5654913 \times 10^{-2}x - 9.2562972 \times 10^{-3}x^2 \\
&\quad + 1.5379983 \times 10^{-3}x^3 - 2.5511754 \times 10^{-4}x^4 + O(x^5), \\
r_1(x) &= 0.66555777 + 5.5654913 \times 10^{-2}x - 9.2562972 \times 10^{-3}x^2 \\
&\quad + 1.5394694 \times 10^{-3}x^3 - 2.5603825 \times 10^{-4}x^4 + O(x^5), \\
r_2(x) &= 0.66555777 - 5.5654913 \times 10^{-2}x - 9.2562972 \times 10^{-3}x^2 \\
&\quad + 1.5379983 \times 10^{-3}x^3 - 2.551175404 \times 10^{-4}x^4 + O(x^5).
\end{aligned}$$

この結果、

- $r_1(x)$ は $r^0(x)$ の Taylor 展開の最初の 2 項が等しい。
- $r_2(x)$ は $r^0(x)$ の Taylor 展開の最初の 4 項が等しい。

が示され、定理 8.3.1. の結果を実験的にも示し得る。

この結果、上で定義した連分数はもとの有理関数に対する Padé 近似に等しい。そこで、Padé 近似を求める手順に近似 GCD の cutoff ϵ を関係付けることができる。その計算手順はつぎで示される。

入力 : 有理関数

$$r^0(x) = \frac{N^0(x)}{D^0(x)} = \frac{\sum_{j=0}^n a_j x^j}{\sum_{j=0}^n b_j x^j}, \quad b_0 = 1$$

微小正数 ϵ

出力 : 近似的 GCD を取り除いた Padé 近似 $r(x)$

方法 :

0. $t = 1/x$ として $r^0(x)$ を t の関数に変数変換する。

$$\hat{r}^0(t) = \frac{\hat{N}^0(t)}{\hat{D}^0(t)}.$$

1. $\hat{N}(t)$ と $\hat{D}(t)$ の近似 GCD を ϵ を与えて求め、(5) 式の連分数展開を作る。
2. (5) 式の連分数を有理関数に展開する。
3. $x = 1/t$ として変数の逆変換を行う。

$$r(x) = \frac{N(x)}{D(x)}$$

8.4 誤差の評価

前節の議論により、近似的 GCD を用いる HRFA が伝統的な Padé 近似と一致することをみた。このようにし

て得た Padé 近似の誤差評価を従来から確立されている多くの手法を用いて行くと、HRFA あるいは近似的 GCD の持つ誤差についての議論も可能になる。ここで興味があるのは、分子と分母の多項式の近接根を取り除いて得られる有理関数近似と、もとの有理関数の誤差である。ここでは、[6] にある Padé 近似の収束の議論を用いて、1 次式の近似的 GCD が存在する場合で、かつ、ある決まった区間における誤差について、それを示す。

1 次の近似的共通因子を持つ有理関数を π_{n+1} とし、近似的共通因子を取り除いた有理関数近似を π_n とする。これを次のように書く。

$$\begin{aligned}\pi_{n+1}(z) &= \frac{P_{n+1}(z)}{Q_{n+1}(z)} \\ \pi_n(z) &= \frac{P_n(z)}{Q_n(z)}\end{aligned}$$

また、 $\eta_{n+1,i} > 1, \xi_{n+1,i} > 1, i = 1, \dots, n+1$ を、各々 $P_{n+1}(z), Q_{n+1}(z)$ の零点とする。さらに、 $P_{n+1}(0) = Q_{n+1}(0) = P_n(0) = Q_n(0) = 1$ と仮定する。ここで、 π_{n+1} の分子と分母の多項式の 1 次の近似的共通因子は、微小正数 $\epsilon \ll 1$ を用いて、次のように定義する。

$$\epsilon = |\eta_{n+1,k} - \xi_{n+1,k}|$$

この時、次の定理を導く事が出来る。

定理 8.4.1. $0 \leq \rho < \sqrt{5} - 2, \Gamma_\rho = \{z : |z| = \rho\}$ とする。その時、

$$\|\pi_{n+1}(z) - \pi_n(z)\|_{C(\Gamma_\rho)} < \epsilon/2$$

が成り立つ。ここで、 $\|p\|_{C(\Gamma)} = \max\{|p(z)| : z \in \Gamma\}$ である。

この定理の証明の過程で [6] に与えられる、次の Lemma を用いる。

補題 8.4.2. (Petrushev) $p \in P_n, \Gamma_{\rho_i} = \{z : |z| = \rho_i\}, i = 1, 2, \rho_1 < \rho_2$ とする。その時、

$$\|p\|_{C(\Gamma_{\rho_2})} \leq \left(\frac{\rho_2}{\rho_1}\right)^n \|p\|_{C(\Gamma_{\rho_1})}$$

次に定理 8.4.1. の証明を行う。

証明

連分数の議論より π_{n+1} と π_n の差は次のように表す事が出来る。

$$\pi_{n+1}(z) - \pi_n(z) = \frac{Az^{2n+1}}{Q_{n+1}Q_n} \quad (6)$$

ここで A は定数である。従って $z = \xi_{n+1,k}$ において A を次のように表すことができる。

$$A = \frac{Q_n(\xi_{n+1,k})P_{n+1}(\xi_{n+1,k})}{\xi_{n+1,k}^{2n+1}} \quad (7)$$

$P_{n+1}(z) = \prod_{i=1}^{n+1} (z - \eta_{n+1,i}) / \prod_{i=1}^{n+1} (-\eta_{n+1,i})$ と表すと、

$$\begin{aligned}P_{n+1}(\xi_{n+1,k}) &= \frac{\prod_{i=1}^{n+1} (\xi_{n+1,k} - \eta_{n+1,i})}{\prod_{i=1}^{n+1} (-\eta_{n+1,i})} \\ &= \xi_{n+1,k}^{n+1} \prod_{i=1}^{n+1} \left(\frac{1}{\xi_{n+1,k}} - \frac{1}{\eta_{n+1,i}} \right)\end{aligned} \quad (8)$$

補題 8.4.2. と (7) 式を用いると、(6) 式から $|A|$ について次の不等式が成り立つ。

$$|A| \leq \frac{\|Q_n\|_{C(\Gamma_\rho)}}{\rho^n} \prod_{i=1}^{n+1} \left(\frac{1}{\xi_{n+1,k}} - \frac{1}{\eta_{n+1,i}} \right)$$

$$\rho < \xi_{n+1,k}$$

つまり、 $0 \leq \rho \leq 1$ であり、この範囲でもとの有理関数は特異点を持たない事を仮定する。また、 $Q_n(z) = \prod_{i=1}^n (z - \xi_{n,i}) / \prod_{i=1}^n (-\xi_{n,i})$ であるから、

$$\begin{aligned} \|Q_n\|_{C(\Gamma_\rho)} &= \left\| \prod_{k=1}^n (z - \xi_{n,i}) / \prod_{i=1}^n (-\xi_{n,i}) \right\|_{C(\Gamma_\rho)} \\ &\leq (1 + \rho)^n \end{aligned}$$

が成り立つ。従って、 $|A|$ は次のように表される。

$$|A| \leq 2^n \epsilon \left(\frac{1 + \rho}{\rho} \right)^n$$

π_{n+1} と π_n の誤差を、 $\|\pi_{n+1} - \pi_n\|_{C(\Gamma_\rho)}$ で表すと、(6) 式より、次の不等式が成り立つ。

$$\|\pi_{n+1} - \pi_n\|_{C(\Gamma_\rho)} \leq \frac{|A| \rho^{2n+1}}{\min_{z \in \Gamma_\rho} |Q_n(z) Q_{n+1}(z)|}$$

ここで、 $\min_{|z|=\rho} \left| \prod_{k=1}^m (z - \xi_{m,i}) / \prod_{i=1}^m \xi_{m,i} \right| \geq (1 - \rho)^m$ を用いると、

$$\begin{aligned} \|\pi_{n+1} - \pi_n\|_{C(\Gamma_\rho)} &\leq 2^n \epsilon \frac{\rho^{2n+1}}{(1 - \rho)^{2n+1}} \\ &= \epsilon \frac{\rho}{1 - \rho} \left(\frac{2\rho(1 + \rho)}{(1 - \rho)^2} \right)^n \end{aligned}$$

ここで、 $\frac{2\rho(1 + \rho)}{(1 - \rho)^2} < 1$ とすると、 $\frac{\rho}{1 - \rho} < \frac{1}{2}$ であり、

$$\|\pi_{n+1} - \pi_n\|_{C(\Gamma_\rho)} < \frac{\epsilon}{2}$$

が得られる。//

例題

$\epsilon = 0.01$ の近似的な共通因子を持つ次のような有理関数 π_3 を考える。

$$\pi_3 = \frac{(x + 2)(x + 3.01)(x + 4)}{(x + 5)(x + 3)(x + 7)}$$

分子と分母が 1 次低い Padé 近似は次のようになる。

$$\pi_2 = \frac{0.229 + 0.171x + 0.0283x^2}{1.00 + 0.340x + 0.0283x^2}$$

π_3 と π_2 の誤差を $x = 0.0, 0.11, 0.23$ の 3 点で調べる。

$$|\pi_3(0) - \pi_2(0)| = 0.00 < 0.005$$

$$|\pi_3(0.11) - \pi_2(0.11)| = 0.132 \times 10^{-11} < 0.005$$

$$|\pi_3(0.23) - \pi_2(0.23)| = 0.468 \times 10^{-10} < 0.005$$

このように、定理 8.4.1. を実際に示す事ができ、例題の場合 十分良い精度で近似が得られている事が分かる。

8.5 まとめ

本論では、ハイブリッド有理関数近似と Padé 近似の関係について述べ、1 次式の近似的 GCD が存在する場合で、かつ、ある決まった区間における誤差の解析を行った。今後の課題は次の通りである。

- 一般的に拡張した誤差の評価
- 近似的 GCD の cutoff ϵ と有理関数近似の誤差の関係

参考文献

- [1]Sasaki, T., and Noda, M.T., Approximate square-free decomposition and root-finding of ill-conditioned algebraic equations, J. Inf. Proc. 12(1989), 159–168.
- [2]M.T. Noda, and E. Miyahiro, A Hybrid Approach for the Integration of a Rational Function, Jour. CAM, March, 1992
- [3]M.T. Noda, E. Miyahiro, and H. Kai, Hybrid rational function approximation and its use in the hybrid integration, in *Advances in Computer Methods for Partial Differential Equations VII*, eds. R. Vichnevetsky, D. Knight and G. Richter, IMACS, pp.565–571, 1992
- [4]J.R. Rice, *The Approximation of Functions II*, Addison-Wesley Pub., 1969, 76–122.
- [5]T.J. Rivlin, *An Introduction to the Approximation of Functions*, Blaisdell Pub., 1969, 120–141.
- [6]P.P.Petrushev, V.A.Popov, *Rational approximation of real functions*, Cambridge University Press, 1987, 342–347.