

ハイブリッド有理関数近似と悪条件問題

中島 裕美* 甲斐 博†
野田 松太郎‡

NTT コミュニケーション基礎科学研究所*
愛媛大学 工学部‡

概 要

A rational interpolation approximates a given function to a rational function, i.e., a ratio of numerator and denominator polynomials. The simplest one is called a naïve rational interpolation, which is obtained by solving a system of simultaneous linear equations. However, when the equation is solved by floating point arithmetic, there appears a pathological feature such as undesired zero and pole. The feature is analyzed in details in this paper. A reason of the appearance of undesired zero and pole is an ill-conditioned property of the system of linear equations. Further, how Hybrid Rational Function Approximation (HRFA) works well for eliminating the feature from the naïve rational interpolation and for obtaining accurate approximation of the given function will be discussed.

1 はじめに

数値数式融合計算は、数式処理の算法に数値計算の手法を導入し、高精度で信頼できる解を高速に求めることを目的として提案された。その発端は、近似 GCD 算法 [8, 6] であるが、これを有効に応用したものに、ハイブリッド有理関数近似がある [2, 7]。ハイブリッド有理関数近似は、与えられた離散点列に対して伝統的な有理関数補間を行うことから出発する。通常の有理関数の議論では、有理関数補間の結果の分子と分母の多項式は既約であることを前提としている。しかし、浮動小数係数を許す分子分母の多項式を考えると、これらは厳密には既約であるものの、近似的に共通な因子を含むことが明らかになっている。すなわち、有理関数補間そのままの結果では、有理関数の分母の多項式に、本来存在すべきではない零点が出現し、有理関数の極となる。そこで、分子分母の近似的共通因子を近似 GCD 算法によって取り除くことを考える。結果の有理関数は、与えられた離散点列を良く近似する関数になっている。これがハイブリッド有理関数

*nakajima@theory.br1.ntt.co.jp

†kai@cs.ehime-u.ac.jp

‡noda@cs.ehime-u.ac.jp

近似である．また，数値計算の誤差を含んだ有理関数補間に対して，計算結果の有理関数の分子と分母の多項式が各々，厳密解と数値的計算による誤差部分の和で表されるとした場合に，分子の誤差部分と分母の誤差部分のみの比もまた，近似すべき有理関数と極めて近いものになっていることが示されている [3]．本論では，これら数値的に示された結果に対して，近似的な共通因子の出現に関する理論的根拠を明らかにすることを目的としている．

これまでの研究では，さまざまな関数に対する有理関数補間を計算することで，上で述べた不必要な極に関して次のような特徴があることが分かっている．

1. 有理関数の分母の補間区間内の零点には，必ず近いところに分子の零点が存在し，近似的な共通因子となる
2. これら是有理関数補間を数値的に計算する場合の数値誤差に起因している

これらの特徴は，数値実験の点からのみ議論されているものの，一般的な議論はされていない．当然ながら，ハイブリッド有理関数近似の成功に関しては，数値実験の立場からの議論しか行うことができなかった．特に，なぜ有理関数補間で現れる不必要な極の近傍に分子の多項式の零点が現われるのか，この出現は一般的に言えるのか等を明確にはできなかった．近似 GCD として除去している分子分母の近似的な共通因子は，厳密な意味で共通因子として除去し得るものであるか否かを明らかにするためには，近似的な共通因子が生じる原因を明確にする必要がある．

本論では，不必要な極の原因とされる分子と分母の近似的な共通因子がいかんして生じるかを解析する．すでに我々は，不必要な極の出現が有理関数補間を求める場合の連立一次方程式の悪条件性に起因することを述べている [4, 5] が，本論ではこの点を再検討するとともに，悪条件性がどのように分子分母の近似的な共通因子に影響するかを明らかにする．

2 有理関数補間と悪条件性

有理関数補間は，関数 $f(x)$ を分子が m 次の多項式 $p_m(x)$ ，分母が n 次の多項式 $q_n(x)$ からなる有理関数 $r_{m,n}(x)$ によって補間する手法である．このとき， $r_{m,n}(x)$ は以下のような有理関数である．

$$r_{m,n}(x) = \frac{\sum_{i=0}^m a_i x^i}{1 + \sum_{j=1}^n b_j x^j} = \frac{a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_m x^m}{1 + b_1 x + b_2 x^2 + \cdots + b_n x^n} \quad \text{for } \alpha \leq x \leq \beta \quad (1)$$

関数 $f(x) \in [\alpha, \beta]$ に対する有理関数補間は次のように計算される． $m+n+1$ 個の離散点 $\alpha = x_0 < x_1 < \cdots < x_{m+n} = \beta$ を与え，対応する関数の値 $f(x_k) = f_k$ ， $k = 0, 1, \dots, m+n$ を求める．ここで， $f_k = r_{m,n}(x_k)$ より，次のように変形する．以下のような $m+n+1$ 個の連立一次方程式を構成する．

$$f_k = \sum_{i=0}^m a_i x_k^i - f_k \sum_{j=1}^n b_j x_k^j \quad \text{for } k = 0, 1, \dots, m+n \quad (2)$$

これから，次のような $m+n+1$ 個の連立一次方程式を得る．

$$\begin{pmatrix} 1 & x_0 & \cdots & -f_0 x_0 & \cdots & -f_0 x_0^n \\ 1 & x_1 & \cdots & -f_1 x_1 & \cdots & -f_1 x_1^n \\ 1 & x_2 & \cdots & -f_2 x_2 & \cdots & -f_2 x_2^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \\ 1 & x_m & \cdots & -f_m x_m & \cdots & -f_m x_m^n \\ 1 & x_{m+1} & \cdots & -f_{m+1} x_{m+1} & \cdots & -f_{m+1} x_{m+1}^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \\ 1 & x_{m+n} & \cdots & -f_{m+n} x_{m+n} & \cdots & -f_{m+n} x_{m+n}^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \\ b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_m \\ f_{m+1} \\ \vdots \\ f_{m+n} \end{pmatrix} \quad (3)$$

この連立一次方程式を解くことによって，有理関数 $r_{m,n}(x)$ の各係数 $a_0, a_1, \dots, a_m, b_1, \dots, b_n$ を求めることができる．しかし，数値計算によって連立一次方程式を解いた場合，元の関数 $f(x)$ が連続であるのに対し，求めた有理関数が極（不必要な極）を生じる場合がある [2, 7, 1]．

有理関数補間により構成される連立一次方程式 (3) の性質を調べると，結果の関数が補間区間で値の変動が少ない場合や，補間点の数を多く取った場合には，左辺の行列のいくつかの行は線形従属に近いものになることがわかる．このような線形従属に近い行は *bad row* と呼ばれ，悪条件行列の典型例として知られている．実際に，(3) の左辺の行列を A と表し，いくつかの具体例に対して，その条件数 $\text{cond}A = \|A\| \|A^{-1}\|$ を計算すると，非常に大きくなることから，悪条件性が明らかになる．ここで $\|A\|$ は行列 A の任意のノルムを表す．このような有理関数補間に対する悪条件問題は，大きく次の 2 種類に分類される．

悪条件な有理関数補間の最初の場合は，正確に有理関数で表されたデータを離散点列に変換して有理関数補間する場合である．実際の補間問題としては，あまり実用的ではないが，問題の本質を探る上では非常に重要である．この場合は，求める有理関数の分子分母の次数以上の次数の有理関数補間を考えると，(3) の左辺の行列はランク落ちすることになる．有理数計算のような厳密な計算で，この問題を解いた場合には，すべての要素が 0 の行が得られる．浮動小数計算で行っても，浮動小数計算の誤差のみで構成される行が求まることになる．このような場合を，非正則行列の場合と呼ぶことにする．一方，より一般に用いられる有理関数補間の場合は，求める有理関数の次数が限定されているわけではない．連立一次方程式 (3) は悪条件にはなるが，厳密なランク落ちをするわけではない．結果として，ランク落ちに非常に近い小さな要素だけで構成される行が生じることになる．このような場合を，正則行列の場合と呼ぶ．一般の悪条件問題では，非正則行列と正則行列の識別ができないが，有理関数補間の問題に限定すれば，連立一次方程式の係数行列が正則行列か否かで，以下のように分類することができる．

1. 非正則行列の場合

有理関数補間の問題において，近似を行う関数 $f(x)$ が厳密な有理関数の形で表せる場合に対応する．連立一次方程式の係数行列には 0 のみか，浮動小数近似の誤差のみで構成される行が含まれ，ランク落ちする．当然，条件数は無限大になる．もちろん，求めようとする有理関数の次数と同じ次数の有理関数補間を厳密計算，または非常に高い精度の計算

で行うと，厳密解を求めることは可能である．いずれの場合でも，求めようとする有理関数補間 $r_{m,n}(x)$ には，厳密解が唯一存在する．

2. 正則行列の場合

有理関数補間の問題において，近似を行う関数 $f(x)$ が \log, \sin, \exp などの連続関数を含む形で表される問題に対応する．このとき，連立一次方程式の係数行列は正則行列となるが，条件数が非常に大きくなる．このような問題では， $f(x)$ を近似できる有理関数補間の厳密解を唯一に定めることはできない．

3 非正則行列の場合

厳密解となる有理関数補間が唯一存在する場合の有理関数補間の問題を考える．ここで，厳密解となる有理関数 $r_{M,N}^*(x)$ を以下のように表す．

$$r_{M,N}^*(x) = \frac{p^*(x)}{q^*(x)} = \frac{a_0^* + a_1^*x + a_2^*x^2 + \cdots + a_M^*x^M}{1 + b_1^*x + b_2^*x^2 + \cdots + b_N^*x^N} \quad (4)$$

この $r_{M,N}^*(x)$ を近似を行う関数 $f(x)$ として，以下の有理関数補間 $\tilde{r}_{m,n}(x)$ を求める問題を考える．

$$\tilde{r}_{m,n}(x) = \frac{\tilde{p}(x)}{\tilde{q}(x)} = \frac{\tilde{a}_0 + \tilde{a}_1x + \tilde{a}_2x^2 + \cdots + \tilde{a}_m x^m}{1 + \tilde{b}_1x + \tilde{b}_2x^2 + \cdots + \tilde{b}_n x^n} \quad (5)$$

ここで， $\deg(p^*(x)) = M < \deg(\tilde{p}(x)) = m$ かつ $\deg(q^*(x)) = N < \deg(\tilde{q}(x)) = n$ ，すなわち，求める有理関数補間 $\tilde{r}_{m,n}(x)$ が，厳密解よりも次数が大きな有理関数であると仮定する．

このとき，連立一次方程式の係数行列が非正則行列となるため，計算過程で厳密にランク落ちを生じる問題となることは記号計算によって容易に確認できる．ここで，ランク落ちを生じる行数を γ とすると，未定係数法により，ランク落ちした部分に対応する γ 個の解（有理関数の係数）が未定記号 $t_1, t_2, \dots, t_\gamma$ で置き換えられる．

連立一次方程式 $Ay = B$ と表し，行列 A のサイズを $\alpha \times \alpha$ とする．解ベクトルを $y = (Y_1, Y_2, \dots, Y_\alpha)$ と表す．Gauss 消去法により三角化された行列を \hat{A} とし，この行列の i 行 j 行目の成分を $\hat{A}_{i,j}$ ，対応する右辺の第 i 成分を \hat{B}_i と表すと，後退代入により，解 Y_k は次のように求まる．

$$Y_k = \frac{1}{\hat{A}_{k,k}} (\hat{B}_k - \hat{A}_{k,k+1}Y_{k+1} - \hat{A}_{k,k+2}Y_{k+2} - \cdots - \hat{A}_{k,\alpha}Y_\alpha)$$

もし， \hat{A} が γ 行のランク落ちを生じているならば，解ベクトル y のうち，次の γ 個の成分を未定記号で置きかえることで，残りの係数を求めることができる．すなわち，

$$Y_\alpha = t_\gamma, \quad Y_{\alpha-1} = t_{\gamma-1}, \quad \dots, \quad Y_{\alpha-\gamma+1} = t_1$$

とにおいて，残りの解 Y_k を t_1 から t_γ を用いて，後退代入によって計算する．したがって，求めた有理関数の各係数は，未定記号 t_1 から t_γ を含んだ形で表されるが，これらの記号が影響する

項は、分割して表すことができる。すなわち、有理関数補間 $\tilde{r}_{m,n}(x)$ は、未定記号 $t_1, t_2, t_3, \dots, t_\gamma$ を含む項に分割して次のように表すことができる。

$$\tilde{r}_{m,n}(x) = \frac{p_0(x) + t_1 p_1(x) + t_2 p_2(x) + \dots + t_\gamma p_\gamma(x)}{q_0(x) + t_1 q_1(x) + t_2 q_2(x) + \dots + t_\gamma q_\gamma(x)}$$

ここで、 $p_0(x), p_1(x), \dots, p_\gamma(x)$ と $q_0(x), q_1(x), \dots, q_\gamma(x)$ はそれぞれ、 x に関する多項式である。ここで、任意の $t_1, t_2, \dots, t_\gamma$ に対して、 $\tilde{r}_{m,n}(x)$ は与えられた関数（すなわち、 $r_{M,N}^*(x)$ ）と一致することから、以下のようなことが分かる。

1. $\gamma = 0$ の場合（ランク落ちしない場合）

$$\tilde{r}_{m,n}(x) = \frac{p_0(x)}{q_0(x)} = r_{M,N}^*(x)$$

が成り立つ。したがって、 $p_0(x) = p^*(x)$ 、 $q_0(x) = q^*(x)$ となる。

2. $\gamma = 1$ のとき

$$\tilde{r}_{m,n}(x) = \frac{p_0(x) + t_1 p_1(x)}{q_0(x) + t_1 q_1(x)} = \frac{p^*(x) + t_1 p_1(x)}{q^*(x) + t_1 q_1(x)} = r_{M,N}^*(x) \quad (6)$$

が成り立つ。上式が成り立つためには、任意の x に関する関数 $u_1(x), v_1(x)$ に対して、

$$p_1(x) = u_1(x)p^*(x), \quad q_1(x) = v_1(x)q^*(x), \quad u_1(x) = v_1(x)$$

が成り立たなければならない。ここで、(6) において、 $t_1 p_1 = \Delta P$ 、 $t_1 q_1 = \Delta Q$ と考えると、このことは Litvinov の結果に示される

$$\tilde{r}_{m,n}(x) = \frac{p^*}{q^*} = \frac{\Delta P}{\Delta Q}$$

と一致する [3]。さらに、 $\deg(v_1(x)) = N + \gamma (= N + 1)$ であるから、仮に $v_1(x) = c_1 + c_2 x$ とおくと、(4) 及び (5) によって、

$$\begin{aligned} \tilde{q}(x) &= q^* + t_1(c_1 + c_2 x)q^* \\ &= 1 + \sum_{i=1}^N b_i^* + t_1(c_1 + c_2 x)(1 + \sum_{i=1}^N b_i^*) \\ &= (1 + t_1 c_1) + (b_1^* + t_1 c_1 b_1^* + t_1 c_2)x + (b_2^* + t_1 c_1 b_2^* + t_1 c_2 b_1^*)x^2 + \dots \\ &\quad + (b_N^* + t_1 c_1 b_N^* + t_1 c_2 b_{N-1}^*)x^N + (t_1 c_2 b_N^*)x^{N+1} \\ &= \tilde{b}_0 + \tilde{b}_1 x + \tilde{b}_2 x^2 + \dots + \tilde{b}_N x^N + \tilde{b}_{N+1} x^{N+1} \end{aligned} \quad (7)$$

となる。ここで、 $b_0 = 1$ であるから、 $c_1 = 0$ であることが分かる。また、 \tilde{b}_{N+1} は未定記号 t_1 で表されるから、

$$\tilde{b}_{N+1} = t_1 = t_1 c_2 b_N^*, \quad c_2 = \frac{1}{b_N^*}$$

となる．したがって $v_1(x)$ 及び b_N^* を用いて表すことができる．

$$v_1(x) = \frac{1}{b_N^*} x, \quad g(x) = 1 + \frac{t_1}{b_N^*} x \quad (8)$$

同様に, $\gamma \geq 2$ の場合について考えると, 一般には以下のように書くことができる．

$$\tilde{r}_{m,n}(x) = \frac{g(x)p^*(x)}{g(x)q^*(x)} = \frac{p^*}{q^*} \quad (9)$$

$$g(x) = \begin{cases} 1 & (\gamma = 0) \\ 1 + \sum_{i=1}^{\gamma} t_i v_i(x) & (\gamma \geq 1) \end{cases}$$

さらに, $v_i(x)$ は, (7) のような計算によって, 分母の厳密解の各係数 b_i^* を用いて表すことができる．

以上の議論より次のことが分かる．

定理 1

$Ay = B$ を解いて得られる有理関数補間を $\tilde{r}_{mn}(x) = \tilde{p}(x)/\tilde{q}(x)$ とし, 有理関数補間は到達不能点を持たないとする．このとき, A が γ 行のランク落ちを生ずる非正則行列ならば, $\tilde{p}(x)$ と $\tilde{q}(x)$ は次数 γ の GCD を持つ．また, その逆も成り立つ．

証明 ある点列をあたえこれらの点列を補間する有理関数補間を計算すると, まれに補間されない点がある．このような点は到達不能点と呼ばれる．到達不能点があると, 分子と分母の多項式は GCD を持つことが知られている．そのような特別な場合は仮定せず, 有理関数補間は点列をすべて補間するか, もしくは A が非正則行列の場合のみを考慮する．

A が非正則行列の時, GCD を持つことは本節の議論から明らかである．逆の場合, 有理関数補間が GCD を持つなら, GCD の次数を k とする．求めるべき係数は, k 個の GCD の係数, $N - k$ 個の分母の多項式の係数, $M - k + 1$ 個の分子の多項式の係数である．よって, 係数の数は $M + N + 1 - k$ となるが, これは式の数 $M + N + 1$ よりも少ない．よって式が一次独立でなくなる．したがって A は非正則行列である．この結果より k はランク落ちの数に等しい． ■

数値計算では, 計算過程の誤差によって, 正しくランク落ちが生じない．したがって, (9) に示される共通因子 $g(x)$ の未定記号 t_i に具体的な数値が代入されるために, 分子と分母で $g(x)$ が近似的な共通因子として残る．これらの結果から, 有理関数の分子分母に現れる近似的な共通因子は, 厳密な意味での共通因子であることが明らかとなった．共通因子の出現は, 連立一次方程式がランク落ちを生じる ($\gamma \geq 1$ である) ことが原因であるが, これは, 補間を行う有理関数の次数 (m, n) が厳密解の次数 (M, N) よりも大きいことに起因する．

3.1 例

近似を行う関数 $f(x)$ として, Runge の関数 $f(x) = 1/(1 + 25x^2)$ を考える．ここで, 有理関数補間を 3 次の有理関数 $\tilde{r}_{3,3}(x)$ とし, 入力データとして, 補間区間 $[-1, 1]$ の間を等間隔に分割

した7点を考える．これらの点から構成される連立一次方程式の係数行列は，非正則行列となるため，ランク落ちを生じる．浮動小数演算により生じる問題点を明確にするために，計算は，数式処理システム Risa/Asir[11] による厳密計算の場合と，浮動小数演算 (IEEE 単精度) の場合とで行った．

3.1.1 厳密計算を行った場合

厳密計算で Gauss 消去法を実行すると，次のような三角化された行列が得られる．

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 & \frac{1}{26} & -\frac{1}{26} & \frac{1}{26} \\ 0 & 2 & 0 & 2 & -\frac{1}{13} & 0 & -\frac{1}{13} \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & \frac{1}{26} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{10}{27} & -\frac{125}{4251} & -\frac{250}{12753} & \frac{5}{4251} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1250}{24089} & -\frac{2050}{216801} & \frac{50}{24089} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{100}{1989} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{26} \\ 0 \\ \frac{25}{26} \\ -\frac{6250}{12753} \\ -\frac{51250}{216801} \\ -\frac{2500}{1989} \\ 0 \end{pmatrix}$$

最後の行でランク落ちが生じていることが分かる．Runge の関数に対して，明らかに冗長な係数を含む有理関数で近似を行うために生じたものと考えられる．したがって， b_3 は任意の定数を用いることができるため，一般に $b_3 = t_1$ とすれば，

$$r_{3,3}(x) = \frac{1 + \frac{t_1}{25}x}{1 + \frac{t_1}{25}x + 25x^2 + t_1x^3} = \frac{1 + \frac{t_1}{25}x}{(1 + 25x^2)(1 + \frac{t_1}{25}x)} = \frac{1}{1 + 25x^2}$$

となり，正確に Runge の関数と一致する．ここで，分子分母の共通因子 $g(x)$ は，

$$g(x) = 1 + \frac{t_1}{25}x$$

である．(8) に示した $\gamma = 1$ の場合の $g(x)$ の理論的な値と対比すると， $b_N^* = b_2^* = 25$ より，上の $g(x)$ の値と一致することが確認できる．

3.1.2 数値計算を行った場合

同様の操作を有効桁数 8 桁の数値計算で行うと，

$$\hat{A} \approx \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 & 0.03846 & -0.03846 & 0.03846 \\ 0 & 2 & 0 & 2 & -0.07692 & 0 & -0.07692 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0.03846 & 0.0 \\ 0 & 0 & 0 & -0.370 & -0.02940 & -0.01960 & 0.00117 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.05189 & -0.04082 & -0.002075 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.05027 & -0.9 \times 10^{-9} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.168 \times 10^{-8} \end{pmatrix}$$

$$\hat{B} \approx (0.03846, 0, 0.9615, -0.4900, -1.020, -1.256, -0.6 \times 10^{-7})^T$$

を得る． $\hat{A}_{7,7} \approx 0.16818348 \times 10^{-8}$ ， $\hat{B}_7 \approx -0.6 \times 10^{-7}$ は，有効桁数 8 桁に対して非常に小さく不正確な値となっており，有理関数近似は以下ようになる．

$$r_{3,3}(x) \approx \frac{(x - 0.70076449)(1.136 \times 10^{-7}x^2 + 1.121 \times 10^{-7}x + 1.0000)}{(x - 0.70076453)(25.000x^2 + 1.4583 \times 10^{-6}x + 1.0000)}$$

分子分母に, $(x - 0.70076449)$ と $(x - 0.70076453)$ という近似的な共通因子が存在する. ここで, 有効桁数に対して小さな項を除去すると,

$$\tilde{r}_{3,3}(x) \approx \frac{(x + 0.70076454)}{(x + 0.70076449)(25.000x^2 + 1.0000)} \approx \frac{(1.0000 - 1.42701294x)p^*}{(1.0000 - 1.42701286x)q^*}$$

となる. ここで, (8) から得られる分子分母の共通因子 $g(x)$ の理論的な値に含まれる未定記号 t_1 が, 数値計算の誤差によって不正確に計算された数値 -35.675323 に置き換えられた場合の $g(x)$ の値を計算すると以下ようになる.

$$g(x) \approx 1 - \frac{t_1}{b_2^*}x \approx 1 - \frac{-35.675323}{25}x \approx 1.0000 - 1.427012x$$

この $g(x)$ の値は, 上で求めた $\tilde{r}_{3,3}(x)$ の近似的な共通因子に非常に近い. このように, 厳密には未定記号で表される共通因子となるものが, 数値誤差によって未定記号 t_1, t_2, \dots に具体的な数値が入ることによって近似的な共通因子として残っていることがわかる.

4 正則行列の場合

正則行列の場合, 前節の議論で厳密解 $r_{M,N}^*(x)$ となる有理関数が一意に定まる. すなわち, 任意の (M, N) の組み合わせに対して, $f(x) \approx r_{M,N}^*$ なる厳密解 $r_{M,N}^*$ が存在する. 例を上げると, $f(x) = \log(x+2)$ に対して, $f(x)$ の高精度な近似となるような有理関数 $r_{3,3}^*(x), r_{3,4}^*(x), r_{4,4}^*(x), \dots$ が存在する.

連続関数の有理関数近似を求める問題は, 数値計算によってランク落ちに近い行が生成されることで, 非正則行列の場合と区別がつかない状況に陥ることにある. 正則行列と非正則行列の距離は次の定理により表される [10].

定理 2

P を非正則行列の集合とする. 行列 A から P までの最小距離を $dist(A, P) = \inf_{S \in P} \|A - S\|$ と表す. その時, 任意のノルムについて,

$$dist(A, P) = \|A^{-1}\|^{-1}$$

が成り立つ.

この定理から次式が成り立つ.

$$dist(A, P) = \frac{\|A\|}{cond(A)} \quad (10)$$

すなわち条件数が大きいと A は非正則行列に近くなり, 浮動小数点数の計算精度によっては, 数値誤差により非正則行列と区別がつかないことになる.

この場合に, 数値計算の結果生じるランク落ちに近い行を厳密にランク落ちする行と考えると, 求める有理関数 $\tilde{r}_{m,n}(x)$ に対して, $M < m, N < n$ なる有理関数 $r_{M,N}^*$ を厳密解とする問題とすることができ, 前節の非正則行列の議論と同様の議論が成り立つ. したがって, 数値計算によって有理関数の分子分母に近似的な共通因子が生じる原因は, 理論的には非正則行列の場合と同様であるといえる.

ただし,連続関数であるために厳密解 $r_{M,N}^*(x)$ を正しく求めることが不可能であり,また, $\tilde{r}_{m,n}(x)$ が,悪条件問題を低い計算精度で解かなければならないことから,有理関数の各係数には大きな誤差が含まれる.また,計算精度によってランク落ちに近い状態となる行数が異なるために, γ の値を決定することが難しく,共通因子 $g(x)$ の理論値 (9) を正しく求めることはできない.数値実験の結果との間には,近似すべき離散点列,どの次数の有理関数を厳密解と考えるか,その他数値計算に関連する複雑な現象が含まれる.

4.1 例

$\log(x+2)$ を 4 次有理関数 $\tilde{r}_{4,4}(x)$ で補間する問題を考える.補間区間 $[0, 1]$ を等間隔に分割した 7 点での補間を考える.すでに述べたように,厳密計算は不可能な場合であるので,浮動小数演算による場合のみを考える.計算精度との関連を調べるために,考える係数行列の条件数に対して,少い計算精度の場合と十分な計算精度の場合とを比較する.具体的にここで考える $\log(x+2)$ の 4 次有理関数補間では,係数行列 A の悪条件性は,

$$\frac{\|A\|}{\text{cond}A} = \frac{9.39444915}{1.34711099 \times 10^{12}} = 6.974 \times 10^{-12}$$

である.前者として有効桁数 9 桁の浮動小数演算を,後者として有効桁数 19 桁での浮動小数演算を行う.なお,本節での計算は PC (PentiumIII 1GHz, 256MB) 上の Risa/Asir[11] を用いて計算を行った.

4.1.1 計算精度が不足している場合

有効桁数 9 桁で解いた場合には, \hat{A} は以下ようになる.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1.1 & -1.1 & -1.1 & -1.1 \\ 0 & 0 & -0.3 & -0.4 & -0.4 & 0.09 & 0.3 & 0.4 & 0.5 \\ 0 & 0 & 0 & 0.05 & 0.08 & 0.004 & -0.02 & -0.06 & -0.1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -0.03 & 0.0005 & -0.002 & 0.008 & 0.04 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.00002 & -0.00007 & 0.0002 & -0.001 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.0000007 & 0.000006 & -0.00007 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.00000002 & -0.0000007 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.00000005 \end{pmatrix}$$

このとき,対応する右辺ベクトル \hat{B} は,

$$(0.7, 0.4, 0.02, 0.001, 0.0002, 0.000009, -0.00000006, 0.5 \times 10^{-9}, -0.3 \times 10^{-9})^T$$

である. $\hat{A}_{9,9}$ と \hat{B}_9 は,有効桁数 9 桁に対して十分に小さな値となっており,前節の Runge の関数の例のように厳密にランク落ちが生じる場合と区別がつかない状態になっている.このとき,得られる有効桁数 9 桁での 4 次有理関数近似 $\tilde{r}_{4,4}^{(9)}$ は,

$$4.58427704 \frac{(x+11.3917223)(x+2.98532954)(x+1.00014414)(x-0.8305033948)}{(x+21.6755621)(x+4.48508283)(x+2.31392256)(x-0.8305033945)}$$

となり, 近似的な共通因子 $(x - 0.8305033948)$ と $(x - 0.830533945)$ を持つ. ここで, 厳密解として $r_{3,3}^*$ を考え, 十分な有効桁数で計算した 3 次の有理関数

$$r_{3,3}^*(x) \simeq \frac{0.69315 + 0.98608x + 0.31337x^2 + 0.020379x^3}{1 + 0.70126x + 0.12658x^2 + 0.0044454x^3}$$

を厳密解の近似解であると考え, 3 節の議論との対比から,

$$\gamma = (m + n + 1) - \text{rank}(A) = (4 + 4 + 1) - 8 = 1$$

より, 共通因子 $g(x)$ は 1 次の多項式 (8) で表せる. 具体的な数値を代入すると, 以下のように求まる.

$$g(x) = 1 + \frac{t_1}{b_3^*}x \simeq 1 + \frac{-0.00535265}{0.00444539}x = -1.20409(-0.830503 + x)$$

ここで, $\tilde{r}_{4,4}(x)$ の近似的な共通因子は, $(x - 0.8305033948)$ と $(x - 0.830533945)$ であるため, 理論的な式 (8) によって与えられる共通因子 $g(x)$ の値とよく一致している.

4.1.2 計算精度が十分な場合

次に, 条件数に対して十分大きな有効桁数 19 桁で計算を行った場合を考える. 係数行列 \hat{A} は,

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1.1 & -1.1 & -1.1 & -1.1 \\ 0 & 0 & -0.3 & -0.4 & -0.4 & 0.09 & 0.3 & 0.4 & 0.5 \\ 0 & 0 & 0 & 0.05 & 0.08 & 0.004 & -0.02 & -0.06 & -0.1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -0.03 & 0.0005 & -0.002 & 0.008 & 0.04 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.00002 & -0.00007 & 0.0002 & -0.001 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.0000006 & 0.000006 & -0.00007 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.00000002 & -0.0000007 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.000000006 \end{pmatrix}$$

となり, 対応する右辺ベクトル \hat{B} は,

$$(0.7, 0.4, 0.02, 0.001, 0.0002, 0.000009, -0.00000006, 0.0000000003, 3.9 \times 10^{-12})^T$$

となる. A の悪条件性に関する値から, $\hat{A}_{9,9}$ と \hat{B}_9 は, 有効桁数 19 桁であることを考慮すれば, 十分正確に表せる大きさの値であり, 正則行列として計算できる. 前節の議論と対応させると, ランク落ちする行数 $\gamma = 0$ となるため, 分子分母の共通因子は存在しない. 実際に, 上の行列から求まる有効桁数 19 桁の 4 次の有理関数 $r_{4,4}^{(19)}$ は,

$$5.07874704 \frac{(x + 19.8514995)(x + 4.86016486)(x + 2.47520498)(x + 1.00000734)}{(x + 35.3462310)(x + 7.04013506)(x + 3.21926893)(x + 2.18428063)}$$

となり, 共通因子を持たない有理関数となる.

このことから、容易に推測できるが、数値数式融合算法を安定に実現するために提案されている安定化技法 [9] を用いると、結果が安定するまで計算桁数を増加させながら再計算を行うので、常に安定した有理関数を求めることが可能である。すなわち、不必要な極のない有理関数が求まる。また、通常の数値計算では識別不可能な、正則行列の場合と非正則行列の場合を正しく識別することが可能である。ただし、安定化技法を用いて、悪条件問題で安定した解を求めるためには、条件数を上回る計算精度が必要であるために、非常に大きな桁数の計算を繰り返し行うことが必要になる。この場合、最初の精度としては、式 (10) を用いると無駄な計算を省略できる。

すなわち、有理関数補間に GCD が現れるのを防ぐには、次のことが言える。

定理 3

A を正則行列とし到達不能点は存在しないと仮定する。 $\|A\|/\text{cond}(A)$ よりも十分小さな誤差で $Ay = B$ の解を計算するならば、得られる有理関数補間に GCD は現れない。

5 まとめ

本論では、有理関数補間を数値計算で求めた場合に生じる、不必要な極と零点の問題についての検討を行った。まず、不必要な極と零点の生じる原因が、有理関数補間を求める場合の連立一次方程式の係数行列の悪条件性によっていることを示した。次に、この係数行列に対する解析を行い、厳密計算を行うと、一般的に有理関数の分子分母には共通因子が存在し、この共通因子の次数がランク落ちを生じる行の数と一致することを示すことができた。さらに、誤差をとまなう数値計算で同じ計算を行うと、厳密な意味ではランク落ちが生じないために、分子分母の共通因子となるべき因子が近似的な共通因子として残ることが明らかになった。この近似的な共通因子が、補間区間に根を持つことが、不必要な極と零点の原因であることが明確になった。

ハイブリッド有理関数近似は、分子と分母の近似的な共通因子を近似 GCD を用いて除去する手法である。本論で分子と分母の近似的な共通因子が厳密な意味での共通因子であることが明らかになったことにより、ハイブリッド有理関数近似の計算手法の理論的根拠を確立することができる。したがって、ハイブリッド有理関数近似は、小さな計算精度で、高精度な近似を得る手法として効果的なものであることを明確にすることができる。

参考文献

- [1] 甲斐 博, 野田 松太郎, ハイブリッド有理関数近似とデータの平滑化, 日本応用数学会論文誌, Vol.3, pp.323–236, 1993.
- [2] H.Kai and M.T.Noda, Hybrid rational function approximation and its accuracy analysis, *Reliable Computing* **6**, pp.429–438, 2000.
- [3] G.Litvinov, Approximate construction of rational approximations and the effect of error autocorrection. Applications, in *Russian Journal of Mathematical Physics*, vol.1, No.3, 1994 <http://arxiv.org/pdf/math.NA/0101042>.
- [4] Y.Murakami, H.Kai and M.T.Noda, Approximate Algebraic Computation for Rational Function Approximations, ACA'2002. (to appear)

- [5] 村上 裕美, 甲斐 博, 野田 松太郎, 区間演算によるハイブリッド有理関数近似と安定化理論について, 京都大学数理解析研究所講究録 1295, pp.197–202, 2002.
- [6] M.T.Noda and T.Sasaki, Approximate GCD and its application to ill-conditioned algebraic equations, *J.Comp.Appl.Math.*, **38**, pp.335–351, 1991.
- [7] 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.
- [8] T.Sasaki and M.T.Noda, Approximate Square-free Decomposition and Root-finding of Ill-conditioned Algebraic Equations, *J. Inf. Proces.*, **12**, pp.159–168, 1989.
- [9] K.Shirayanagi and M.Sweedler, A Theory of Stabilizing Algebraic Algorithms, *Technical Report 95-28*, Cornell University, pp.1–92, 1995.
- [10] J.W.Demmel, On Condition Numbers and the Distance to the Nearest Ill-posed Problem, *Numer. Math.*, **51**, pp.251–289, 1987.
- [11] M.Noro and T.Takeshima, Risa/Asir - a Computer Algebra System, ISSAC'1992, pp.387–396.