

二変数有理関数近似のハイブリッド計算

Hybrid Computation of Bivariate Rational Function Approximation

甲斐 博[†]
Hiroshi Kai

野田 松太郎[†]
Matu-Tarow Noda

[†]愛媛大学 工学部
Faculty of Engineering, Ehime University

概要

我々はハイブリッド計算による一変数の有理関数近似を提案して来た。本論では、二変数の場合について検討する。二変数有理関数補間として General Order Newton-Padé Approximant と呼ばれる方法が提案されている。一変数の場合と同様に、与えたデータに対し滑らかな近似を得ようとする、不必要な特異点を生じることを示す。本論では多変数近似 GCD を用いることにより不必要な特異点を取り除くことを考える。

1 はじめに

ハイブリッド計算とは、工学や物理等の科学技術計算に幅広く応用されている数値計算と常に正確な解を求め記号計算が可能な数式処理を有機的に結合した計算を意味し、より有効なアルゴリズムを開発しようとする試みである。

我々は、ハイブリッド計算アルゴリズムの一つである近似 GCD 算法を一変数の有理関数補間に応用するを行い、新しい有理関数近似を提案して来た [8] [9]。一変数の有理関数補間を用いて関数近似を行おうとした場合、高精度の近似を得ようとして関数近似の次数を大きくすると、得られる有理関数が近似区間において不必要な極を持つ場合がある。実験的にそのような極は分子の零点と近似的に同じ点に現れることを示した。したがって、分子と分母の近似 GCD を計算して単純に除去すれば良い。この方法をハイブリッド有理関数近似と呼んでおり、データの平滑化や Cauchy 主値積分や Cauchy 特異積分方程式などへの応用を示している [5] [6] [7]。

本論では、二次元のデータとその点での連続関数の近似値が与えられた時、そのデータに対する有理関数近似を求めることを検討する。

データ列に対する有理関数近似の一つとして有

理関数補間を考える。二変数の有理関数補間の方法として、得られる有理関数補間が連分数の形で表される方法 [4] [11] や、有理式の形で表される General Order Newton-Padé Approximants と呼ばれる方法 [2] が提案されている。この時、二変数の有理関数補間は、一変数の場合と同様に不必要な近似 GCD を持つ場合があるかどうか数理的な興味がある。

本論では、General Order Newton-Padé Approximants を数値的に求めてみると不必要な特異点を持つ場合があることを実験結果を用いて示す。さらに、不必要な特異点の除去を一変数の場合と同様に近似 GCD を用いて行うことを試みる。多変数の近似 GCD として提案されている方法には、Ochi 等により提案された方法 [10] や、Corless 等により提案された近似 GCD [1] が知られているが、本論では Corless 等による近似 GCD を用いる。この方法は数値計算の特異値分解法を用い、記号計算は数式処理上で行われる。

与えられるデータ列がある有理関数の関数値に近い値であり、より大きい次数で有理関数補間を得る場合には不必要な特異点が生じることを実験的に示す。近似 GCD を取り除き結果として得られる有理関数近似は、データをある誤差を持って補間する有

理関数近似になる。

しかし一般には、初等関数などを近似する場合、現在提案されているような近似GCDでは除去が困難である不必要な特異点が表れることも実験的に示す。

2 Multivariate General Order Newton Padé Approximants

二変数有理関数補間を求める方法が提案されている [2] では有理関数の係数は行列式の計算を用いて求められる。また、係数を求めるのではなく直接データ点での有理関数補間の近似値を得る場合の再帰的アルゴリズムを用いる方法も提案されている [3]。本論では、[2] で示された方法を用いる。

$f_{i,j}^{(k)}, k = 0, \dots, r_{ij}$ をデータ点 (x_i, y_j) 上で与えられる値とする。データ点の i, j は $(i, j) \in E \subseteq \mathbf{N}^2$ のような組とする。ここで E は、もし $(i, j) \in E$ ならば $(k, l) \in E, k \leq i, l \leq j$ を満足するような条件 (inclusion property と呼ばれる) を満たす集合である。

多変数多項式 $B_{ij}(x, y) = \prod_{k=0}^{i-1} (x - x_k) \prod_{l=0}^{j-1} (y - y_l)$ と [2] で定義される差分の値 $f_{0i,0j} = f[x_0, \dots, x_i][y_0, \dots, y_j]$ を用いて、次の級数を定義する。

$$f(x, y) = \sum_{(i,j) \in \mathbf{N}^2} f_{0i,0j} B_{ij}(x, y)$$

この時、 $f(x, y)$ に対する Newton Padé 近似の分子と分母の多項式 $p(x, y), q(x, y)$ は次のようになる。

$$p(x, y) = \sum_{(i,j) \in N} a_{ij} B_{ij}(x, y),$$

$$q(x, y) = \sum_{(i,j) \in D} b_{ij} B_{ij}(x, y),$$

$$(f \cdot q - p)(x, y) = \sum_{(i,j) \in \mathbf{N}^2 \setminus E} d_{ij} B_{ij}(x, y).$$

ここで N, D, E は \mathbf{N}^2 の部分集合を表し次の性質を持つ。

- $N \subset E$
- D は $m + 1$ 個の要素を持ち、 $(i_0, j_0), \dots, (i_m, j_m)$ と表す。
- $E \setminus N$ は少なくとも m の要素を持つ。

さらに、 m の要素をもつ $E \setminus N$ の部分集合 $H = \{(h_1, k_1), \dots, (h_m, k_m)\}$ を定義する。

このとき a_{ij}, b_{ij} は次のように決定される。もし、

次の行列

$$\begin{pmatrix} f_{i_0 h_1, j_0 k_1} & \cdots & f_{i_m h_1, j_m k_1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f_{i_0 h_m, j_0 k_m} & \cdots & f_{i_m h_m, j_m k_m} \end{pmatrix} \quad (1)$$

の階数が m ならば、次の行列式を計算することにより、有理関数補間を得ることが出来る。

$$p(x, y) = \begin{vmatrix} s_0(x, y) & \cdots & s_m(x, y) \\ f_{i_0 h_1, j_0 k_1} & \cdots & f_{i_m h_1, j_m k_1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f_{i_0 h_m, j_0 k_m} & \cdots & f_{i_m h_m, j_m k_m} \end{vmatrix},$$

$$q(x, y) = \begin{vmatrix} B_{i_0 j_0}(x, y) & \cdots & B_{i_m j_m}(x, y) \\ f_{i_0 h_1, j_0 k_1} & \cdots & f_{i_m h_1, j_m k_1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f_{i_0 h_m, j_0 k_m} & \cdots & f_{i_m h_m, j_m k_m} \end{vmatrix}.$$

ここで、 $s_k(x, y) = \sum_{(i,j) \in N} f_{i_k i, j_k j} B_{ij}(x, y)$ である。

この方法を用いて、与えられたデータの近似を連続関数として得ることを考える。 N, D, E の与え方は多くの場合があるが、本論では次のように与える。

$$N = \{(i, j) \mid 0 \leq i + j \leq n_1\} \cup \left\{ \left(\left\lfloor \frac{n_1 + 1}{2} \right\rfloor, \left\lfloor \frac{n_1 + 1}{2} \right\rfloor \right) \right\} \quad (2)$$

$$D = \{(i, j) \mid 0 \leq i + j \leq n_2\} \quad (3)$$

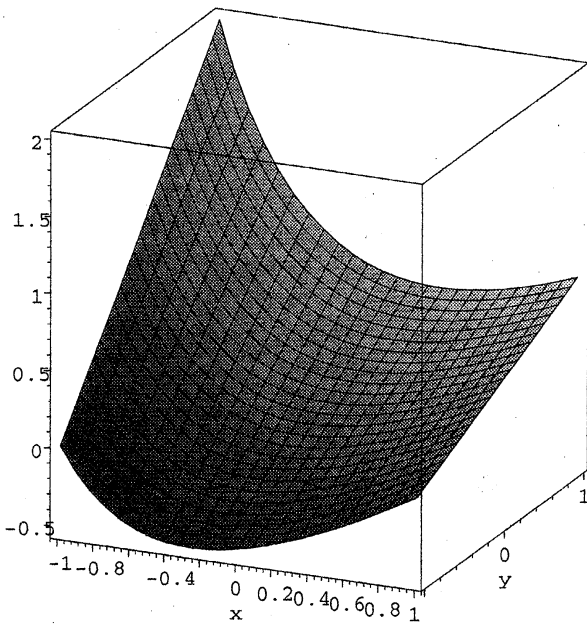
$$E = \{(i, j) \mid 0 \leq i \leq n_3, 0 \leq j \leq n_3\} \quad (4)$$

ここで、もし未知の関数の関数値として $\tilde{p}(x, y)/\tilde{q}(x, y)$ に近い値が与えられた場合、次数のより大きな $p(x, y)/q(x, y)$ で有理関数補間をしようとする、 $p(x, y) \approx \tilde{p}(x, y)g(x, y), q(x, y) \approx \tilde{q}(x, y)g(x, y)$ で表されるかもしれない。もし、 $p(x, y)$ と $q(x, y)$ がこのような近似GCD $g(x, y)$ を持つなら、不必要な特異点として表れる場合があると考えられる。実際に次の例を考える。

例 1

例題として $f(x, y) = (x^2 + y)/(x + 2)$ の関数の各データ点での値に $O(10^{-7}(x, y))$ の大きさの乱数を加えた値を関数値とする。各データ点は N, D, E をそれぞれ (2) 式, (3) 式, (4) 式のように与える。ここで、パラメータ n_1, n_2, n_3 はそれぞれ $n_1 = 4, n_2 = 3, n_3 = 4$ とする。また、 x, y の値として $x_i = y_i = -1.0 + i/2, i = 0, \dots, 4$ により与える。この時、分子と分母の多項式は次のように得られる。

$$p(x, y) = -1.2313x^4 + (4.5585 \times 10^{-6}y^3$$

図1 $p(x,y)/q(x,y)$

$$\begin{aligned}
 &+6.8377 \times 10^{-6}y^2 + 3.1658y \\
 &+0.54796)x^3 + (6.8377 \times 10^{-6}y^3 + \\
 &1.6351y^2 - 1.5142y + 0.28749)x^2 \\
 &+(-5.7044 \times 10^{-6}y^3 + 3.1658y^2 \\
 &+0.54802y + 1.2826 \times 10^{-5})x \\
 &-1.1347 \times 10^{-7}y^4 + 1.6351y^3 \\
 &-0.28287y^2 + 0.28750y \\
 &+6.6992 \times 10^{-8}, \\
 q(x,y) = &-1.2314x^3 + (3.1658y - 1.9147)x^2 \\
 &+(1.6351y^2 + 6.0488y + 1.3835)x \\
 &+2.9831 \times 10^{-6}y^3 + 3.2702y^2 \\
 &-0.56574y + 0.57500.
 \end{aligned}$$

ここで、数式処理システム Risa/Asir 上で計算を行い、倍精度浮動小数計算を用い、各データに与えた微小な乱数値として Risa/Asir 上の組み込み関数 `random()` から得られる値を用いた。

$p(x,y), q(x,y)$ から求めた (1) 式の行列の最小特異値は $O(10^{-7})$ であり階数は落ちかかっている。得られた有理関数補間の関数形を図 1 に示す。しかし、図 2 に示すように $x \approx -0.202, y \approx 0.326$ の近くを拡大すると不必要な特異点により鋭い極が存在することがわかる。

このような特異点は分子と分母の近似的な共通因子が表れていると考えられ、次節で分子と分母の多項式の近似的な共通因子を求めることを行う。

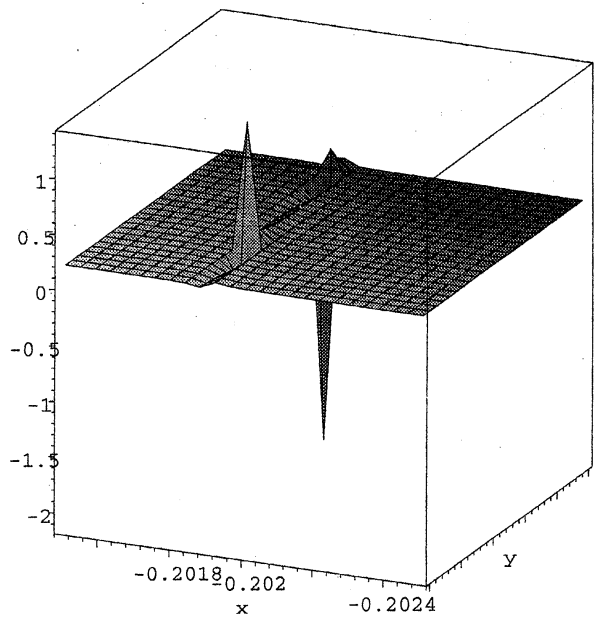


図2 不必要な特異点

3 Corless 等による多変数近似 GCD

Corless 等により提案されている多変数(本論の場合は二変数)の近似 GCD のアルゴリズムは補間を基本にしている。本論では二変数の場合について述べる。

$p(x,y)$ と $q(x,y)$ の近似 GCD を求めるとき、 x の乱数値 $x = \alpha$ を取り、 $p(\alpha,y), q(\alpha,y)$ の近似 GCD $g_y(y)$ を一変数の近似 GCD アルゴリズムで計算する。これは Corless 等が提案している特異値分解法を使った近似 GCD アルゴリズム [1] が適用できる。ここで、 k 次の多項式が得られたとする。

次に x を主変数として、乱数値 β_i を $y = \beta_i$ として $p(x, \beta_i), q(x, \beta_i)$ の近似 GCD $g_i(x)$ を求める。 $g_i(x)$ はモノックであるとする。 l 次の近似 GCD が得られた場合、 $p(x,y), q(x,y)$ の近似 GCD は

$$x^l + \frac{a_{l-1}(y)}{a_l(y)}x^{l-1} + \dots + \frac{a_0(y)}{a_l(y)}$$

の形になると考えられる。 $a_l(y)$ は x を主変数としたときの主係数を表す。各 $a_i(y)$ は k 次の多項式であるとし係数を未知数として、連立方程式が構成できる。得られた連立方程式を特異値分解法を用いて解くことにより近似 GCD の係数が決定できる。

このとき、乱数値をどのように取るかは自由であるが、値が `unlucky` な場合や、GCD 計算において用いる Vandermonde 系の条件数が大きくなる場合には、アルゴリズムが失敗するかもしくは不安定に

なると指摘されている [1] [12]。

多変数近似GCDのアルゴリズムを用いて、例1の近似GCDを求めると次の結果が得られる。

$$\begin{aligned} g_1(x, y) &= \text{GCD}(p_1(x, y), q_1(x, y); 10^{-3}) \\ &= x^2 + (-2.5714y - 0.44508)x \\ &\quad - 1.3283y^2 + 0.22987y - 0.23340 \end{aligned}$$

但し、 y に代入する乱数値として5点を取ることを考え、乱数値ではなくChebyshev多項式の零点を取ることを行った。零点は一般に $-1 \sim 1$ の値になるが、何回かの実験の上これを $0 \sim 4$ の区間に置き直した値を用いることを行った。得られた近似GCDを分子と分母の多項式 $p_1(x, y), q_1(x, y)$ から除算により近似により取り除くと次の結果がえられる。

$$\begin{aligned} \tilde{p}_1(x, y) &= p_1(x, y)/g_1(x, y) \\ &= 1.0000x^2 + (-3.7020 \times 10^{-6}y^3 \\ &\quad - 5.5531 \times 10^{-6}y^2 + 3.1667 \times 10^{-4}y \\ &\quad + 6.3227 \times 10^{-5})x - 9.5194 \times 10^{-6}y^4 \\ &\quad - 2.1480 \times 10^{-5}y^3 + 1.1384 \times 10^{-3}y^2 \\ &\quad + 1.0002y - 5.1682 \times 10^{-5} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{q}_1(x, y) &= q_1(x, y)/g_1(x, y) \\ &= 1.0001x + 5.0311 \times 10^{-4}y + 2.0001 \end{aligned}$$

$O(10^{-3})$ でこれらの多項式を表すと

$$\tilde{p}_1(x, y) = 1.000x^2 + 0.001y^2 + 1.000y$$

$$\tilde{q}_1(x, y) = 1.000x + 2.000$$

であり、近似GCDにより不必要な特異点を取り除いた有理関数を得ることができる。

4 近似GCDでは取り除けない場合

前節では多変数近似GCDを用いて不必要な極を取り除くことが出来る例を示したが、本節では一般にどのような場合でも不必要な極を近似GCDを取り除けるわけではないことを示す。

例2

$f(x) = \log(x+y+1)$ として、7桁で丸めた値を各データ点上で与える。 N, D, E の与え方は例1の同じとする。しかし、 x, y の値は $x_i = y_i = i/8, i = 0, \dots, 4$ とする。この時分子と分母の多項式は以下のようなになる。

$$\begin{aligned} p_2(x, y) &= -0.013945x^4 + (-0.0036747y^3 \\ &\quad + 0.0013780y^2 + 0.026453y \\ &\quad + 0.059279x^3 + (0.0013780y^3 \\ &\quad + 0.080510y^2 + 0.98197y \end{aligned}$$

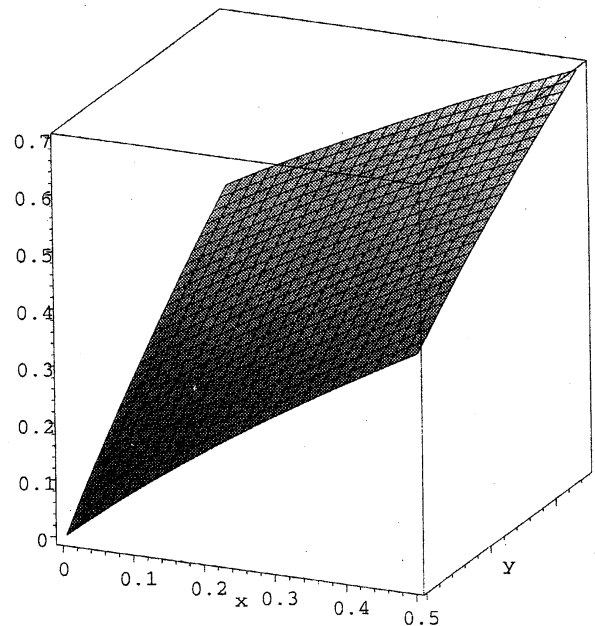


図3 $p_2(x, y)/q_2(x, y)$

$$\begin{aligned} &+ 0.35239x^2 + (0.026453y^3 \\ &+ 0.98196y^2 + 0.70506y \\ &- 0.28985)x - 0.013945y^4 \\ &+ 0.059279y^3 + 0.35239y^2 \\ &- 0.28985y \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} q_2(x, y) &= -0.019974x^3 + (0.41137y \\ &+ 0.25787)x^2 + (0.41137y^2 \\ &+ 1.3231y + 0.20773)x \\ &- 0.019974y^3 + 0.25787y^2 \\ &+ 0.20773y - 0.28987 \end{aligned}$$

同様に、(1)式の最小特異値を求めてみると $O(10^{-3})$ であり、条件を満たす。得られた関数形を図3に示す。しかし、この場合も、不必要な極が存在することが図4より得られる。図4は $x \approx 0.26, y \approx 0.31$ の近くを拡大した図である。

一方、図の表示範囲を拡大して $x \in [-50, 50], y \in [-50, 50]$ において得られた分子と分母の多項式の零点 $p_2(x, y) = 0, q_2(x, y) = 0$ を図5、図6に示す。この範囲では $p_2(x, y)$ と $q_2(x, y)$ の零点は大きく異なり近似GCDで取り除けるような近似的共通因子を持たないことが示される。このような場合、Corless等の近似GCDを用いて有理関数近似の不必要な極を取り除くことはできない。

しかし、近似区間 $x, y \in [0, 0.5]$ では非常に近接している。同じような考え方を適用するためには何らかの方法の改良が必要である。

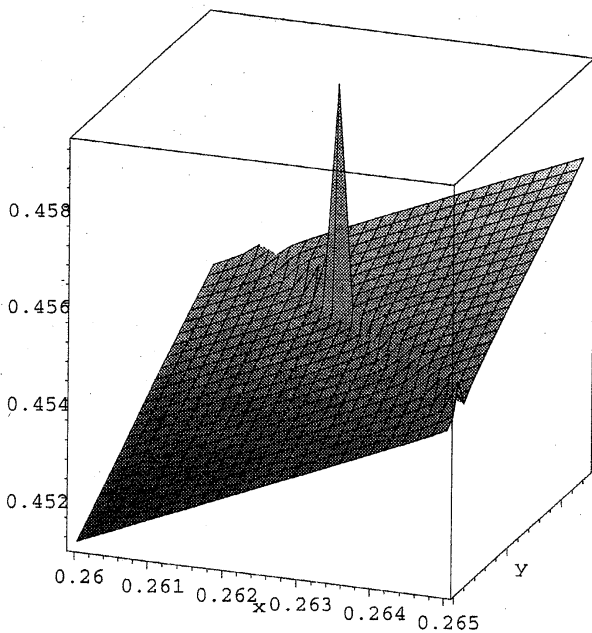


図4 不必要な特異点

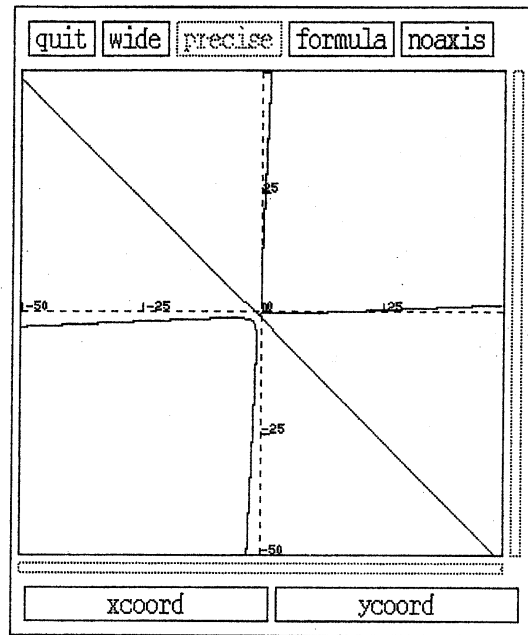


図6 $q_2(x, y) = 0$

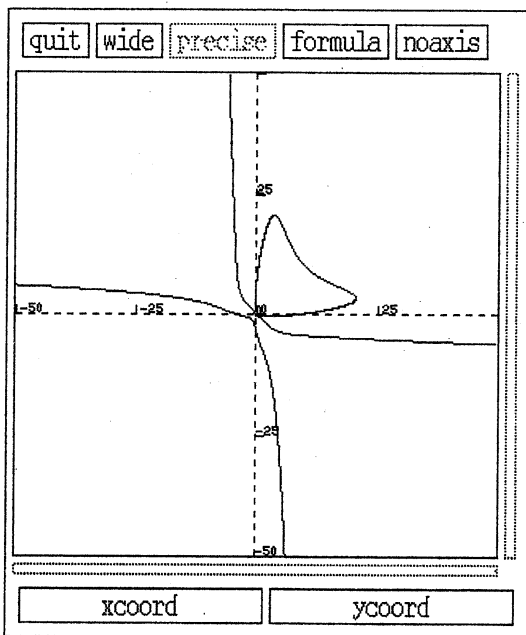


図5 $p_2(x, y) = 0$

5 まとめ

本論では、二変数有理関数補間の方法として General Order Newton Padé Approximants を考え、与えられたデータに対し連続な有理関数近似を得ることを考えた。その場合に一変数の有理関数補間の場合に頻繁に起こる不必要な極の問題があるかどうか数値的な興味がある。

数値的に有理関数補間の係数を決定してみると二変数の場合にも不必要な特異点が表れることを示した。

与えられたデータが次数の低い有理関数の間数値に近い場合、次数の大きな有理関数補間を用いてそのデータを近似すると、不必要な特異点として近似的な共通因子が表れる場合がある。本論では、Corless等により提案された多変数近似GCDを用いることにより、不必要な特異点を取り除くことができた。

しかし、一般には例2のように近似GCDの考え方では除去できない不必要な特異点が存在する場合があることを示した。

参考文献

- [1] R. M. Corless, P. M. Gianni, B. M. Trager and S. M. Watt, The Singular Value Decomposition for polynomial systems, *ISSAC*, pp. 195-207, 1995.
- [2] A.A.M. Cuyt and B.M. Verdonk, General Order Newton-Padé Approximants for Multivariate Functions, *Numer. Math.*, Vol.43, pp.293-307, 1984.
- [3] A.Cuyt, A Recursive Computation Scheme for Multivariate Rational Interpolants, *SIAM J. Numer. Anal.*, pp.228-239, 1987.
- [4] A.Cuyt and L.Wuytack, *Nonlinear Methods in Numerical Analysis*, 1987.
- [5] 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.323-336, 1993.

- [6] H. Kai and M.-T. Noda, Cauchy Principal Value Integral using Hybrid Integral, SIGSAM BULLETIN, Vol. 31, No. 3, pp.37-38, 1997.
- [7] H. Kai and M.-T. Noda, Hybrid Computation of Cauchy-type Singular Integral Equations, SIGSAM BULLETIN, Vol. 32, No. 2, pp.59-60, 1998.
- [8] Hiroshi Kai and Matu-Tarow Noda, Accuracy Analysis of Hybrid Rational Interpolation, Proceedings of IMACS ACA'98, Electronic Proceedings, <http://www-troja.fjfi.cvut.cz/aca98/sessions/approximate/kai/index.html>, pp.1-8, 1998.
- [9] M.T.Noda, E.Miyahiro and H.Kai, Hybrid rational function approximation and its use in the hybrid integration, *Advances in Computer Methods for Partial Differential Equations VII*, IMACS, pp. 565-571, 1992.
- [10] M.Ochi, M.T.Noda and T.Sasaki, Approximate Greatest Common Divisor of Multivariate Polynomials and Its Application to ill-Conditioned Systems of Algebraic Equations, *Journal of Information Processing*, 14(3), pp.292-300, 1991.
- [11] W Siemaszko, Thiele-type branched continued fraction for two-variable functions, *J. Comp. Appl. Math.*, Vol.9, pp.137-153, 1983.
- [12] Lihong Zhi, Matu-Tarow Noda, Approximate-GCD of Multivariate Polynomials, 京都大学数理解析研究所「数式処理における理論とその応用の研究」, Nov., 1999.