数理解析研究所講究録
第 1955 巻 2015 年 27-32

浮動小数点係数の Padé 近似計算について
Computation of Padé approximation with floating-point coefficients

三宅 宏季
HIROKI MIYAKE
愛媛大学大学院理工学研究科
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE AND ENGINEERING, EHIME UNIVERSITY *

甲斐 博
HIROSHI KAI
愛媛大学大学院理工学研究科
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE AND ENGINEERING, EHIME UNIVERSITY †

Abstract

Padé approximation is a rational approximation constructed from the coefficients of a power series of a given input function. It can be obtained by the extended Euclidean algorithm, but the algorithm is unstable if the computations are performed with floating point arithmetic. In this paper, we show an algorithm to compute Pade approximation with floating point coefficients using the theory of stabilizing algebraic algorithm.

1 序論

Padé 近似とは与えられた関数を有理関数の形で近似する手法である．関数のある展開点におけるべき級数展開を求め，得られたべき級数展開の係数から Padé 近似の係数を決定する．Padé 近似はべき級数展開に比べ高精度の近似が得られることで知られており，工学などの様々な問題に幅広く用いられている [5]．Padé 近似の係数の決定は線形方程式やより高速に計算できる拡張ユークリッド互除法を解くことで計算できる．しかし，Padé 近似が normal でない場合（Padé 近似が与えた次数よりも小さな次数の有理関数になる場合）に，浮動小数点計算を用いると，Froissart doublets と呼ばれる分母の零とそれに近接する分子の零が生じる [2]．Ibryaeva らは線形方程式を解く方法を改良し，行列のランクを特異値分解により推定し，正しい次数の Padé 近似を計算する方法を提案している．本研究では，拡張ユークリッド互除法を用いた Padé 近似の計算アルゴリズムに対して，安定化理論 [1] を導入し，正しい次数の Padé 近似を得るアルゴリズムを提案する．

*miyake@hpc.cs.ehime-u.ac.jp
†kai@hpc.cs.ehime-u.ac.jp

2　浮動小数計算によるPadé 近似について

2.1　Padé 近似の計算方法

関数 $f(z)$ を与えたとき，ある展開点におけるテーラー級数展開を $f(z) = \sum_{i=0}^{m+n} c_i z^i + O(z^{m+n+1})$ とする．有理関数

$$[m/n]_f(z) = \frac{p_m(z)}{q_n(z)} = \frac{a_0 + a_1 z + a_2 z^2 + \cdots + a_m z^m}{1 + b_1 z + b_2 z^2 + \cdots + b_n z^n}$$

について，

$$q_n(z)f(z) - p_m(z) = O(z^{m+n+1})$$

となるようなものを $f(z)$ に対する (m,n) Padé 近似と呼ぶ．

Padé 近似の定義から Padé 近似の分母の係数は以下の連立方程式を解くことで計算できる．

$$\begin{bmatrix} c_{m-n+1} & c_{m-n+2} & \cdots & c_m \\ c_{m-n+2} & c_{m-n+3} & \cdots & c_{m+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_m & c_{m+1} & \cdots & c_{m+n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_n \\ b_{n-1} \\ \vdots \\ b_1 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} c_{m+1} \\ c_{m+2} \\ \vdots \\ c_{m+n} \end{bmatrix}$$

また，分子の係数は分母の多項式を用いて以下を解くことで計算できる．

$$\begin{aligned} a_0 &= c_0 \\ a_1 &= c_1 + b_1 c_0 \\ &\vdots \\ a_m &= c_m + \textstyle\sum_{i=1}^{\min(m,n)} b_i c_{m-i} \end{aligned}$$

この Padé 近似を求める方法の計算量は $O(n^3)$ であることが知られている [4].

Padé 近似を得る他の方法として拡張ユークリッド互除法を用いた方法 [6][7] がある．この手法の実装は [4] に示されているが，計算量は $O(n^2)$ であることが知られており，上で示した線形方程式を用いた方法よりも速く計算できる．そのアルゴリズムを以下に示す．

アルゴリズム 1 (拡張ユークリッド互除法による Padé 近似)
入力: べき級数 s，変数 x，分子の次数 m，分母の次数 n

1. $N := m+n, a(x) := x^{N+1}$
2. $b(x) := s(x) \bmod x^{N+1}$
3. $n = 0$ のとき b を出力し終了する．
4. $c := 0, d := 1, i := 0, t := b$
5. $b \neq 0$ かつ $i < n$ である限り以下の処理を行う．
   (a) $q := \mathrm{quo}(a,b), r := \mathrm{rem}(a,b)$.
   (b) $j = 2 \sim deg(q)$ まで i に 1 を加算する．

(c) $i \geq n$ のとき *6.* へ進む.

(d) $i < n$ のとき以下の処理を行う.

i. $r1 := c - qd$

ii. $i = i + 1$

iii. $r \neq 0$ のとき $t := r/r1$

iv. $a := b, b := r, c := d, d := r1$

6. t を出力し終了する.

アルゴリズム 1 の問題点として，ユークリッド互除法を用いている点がある．ユークリッド互除法は不安定なアルゴリズムと知られており，精度をあげても真の解に収束しない．浮動小数点数で計算した場合に，手順 5 に現れるゼロ判定が正しく行えないため，正しくループを抜けられないことが挙げられる．

また Padé 近似の関数形を計算する場合，Padé 近似が normal でなければ，丸め誤差などにより極が発生しその極を打ち消すために分子にも近接根が生じることが知られている．その極と零のペアは Froissart doublets と呼ばれる．Froissart doublets を発生させずに Padé 近似を得る方法として，線形方程式を解く方法を改良し，特異値分解を用いて特異ベクトルを計算することで Padé 近似を導出する方法 [2] が Ibryaeva らにより提案されている．本研究では Ibryaeba とは異なるアプローチとして安定化理論を用いる方法を検討する．

3 拡張ユークリッド互除法を用いた Padé 近似に対する安定化理論の適用

Padé 近似のアルゴリズム 1 に対して安定化理論 [1] を適用する．関数 $f(x)$ は正確に与えられていると仮定し以下の手順で計算を行う．

1. 入力の関数 $f(z)$ の Taylor 係数を求める．
2. Padé 近似を以下のように求める．
   (a) 入力となるべき級数の係数を区間数に置き換える．
   (b) Padé 近似のアルゴリズム 1 に従い区間数で計算を行う．また，計算が行われる度にゼロ書き換えを行う．
3. 精度を上げてステップ 1, 2 を用いて Padé 近似を再計算する．

次の実行例では浮動小数点演算の精度を 19 から開始し，正しく近似が得られるまで精度を上げる．ここで，計算機環境は CPU: Core i7-4770 3.4GHz, メモリ: 8GB のコンピュータを利用し，Windows 版 VMWare Player6.01 上の CentOS 6.5 で Risa/Asir Version 20140912 を用いた．安定化理論を使った方法でも利用するため，区間演算パッケージを含めてコンパイルしている．

例 1

$z = 0$ における関数 $f(z) = \frac{(z+1)(z-2)}{(z+10)(z-1)}$ の $(50, 50)$ *Padé* 近似を計算する．この例は入力がもともと有理関数であるのでその *Padé* 近似を得ることに意味はないが，*Padé* 近似が *normal* でないた

め，計算が不安定になりやすい．結果は明らかに $(2,2)$ 次の有理関数として出力されるべきである．表 *1* に示すように，精度をあげていくと *Padé* 近似の次数が安定して，入力の有理関数の次数と一致する次の有理関数が得られた．

$$[50/50]_f(z)=\frac{[-0.10000,-0.099999]z^2+[0.099999,0.100000]z+[0.199999,0.200000]}{[-0.100000,-0.099999]z^2+[-0.900000,-0.899999]z+[0.999999,1.000000]}$$

表 1: 例 1 の分母と分子の次数

計算精度	次数	計算精度	次数
19	[19,1]	67	[24,24]
28	[38,1]	77	[24,24]
38	[38,1]	86	[5,5]
48	[44,44]	96	[5,5]
57	[44,44]	105∼	[2,2]

例 1 のように，安定化理論により拡張ユークリッド互除法によるアルゴリズムで正しい近似を得ることができるが，近似が収束するまでに得られる次数に法則がなく，いつ正しい近似を得られたかどうかが分からない．最終的に収束する正しい 1 つの次数を求めるために，本研究では次の Padé 近似が満たすべき性質 [5] について考える．

定理 1 (Duality)
$f(0)\neq 0$ である関数 $f(z)$ に対して，新たな関数 $g(z)=1/f(z)$ を定義する．このとき，*Padé* 近似 $[m/n]_f(z),[n/m]_g(z)$ が存在するならば，以下の式が満たされる．

$$[n/m]_g(z)=\frac{1}{[m/n]_f(z)}$$

定理 1 は求める Padé 近似の分母の次数と分子の次数は異なっている場合でも成立するという性質を持つ．この性質を利用して，$[n/m]_g(z)$ と $\frac{1}{[m/n]_f(z)}$ をそれぞれ計算し，次数や係数を比較することで，真の解に収束したかどうかを判定する．以下に提案アルゴリズムを示す．

アルゴリズム 2 (提案アルゴリズム)
入力: 関数 $f(z)$，分子の次数 m，分母の次数 n，展開点 a

1. 関数 $g=1/f$ と定義し，展開点 $z=a$ での f と g の *Taylor* 係数を求める．
2. f の *Padé* 近似 $[m/n]_f$ と g の *Padé* 近似 $[n/m]_g$ を以下のようにそれぞれ求める．
   (a) 入力となるべき級数の係数を区間数に置き換える．
   (b) *Padé* 近似のアルゴリズム *1* に従い区間数で計算を行う．また，計算が行われる度にゼロ書き換えを行う
3. $[m/n]_f$ と $[n/m]_g$ の係数を比較し，等しいかどうか検証することで正しく近似が得られたかを確認する．正しい近似が得られるまで，精度を上げてステップ *1,2* の計算を行う．

提案アルゴリズムに対して Risa/Asir 上で数値実験を行った．

例 2

有理関数 $f(z)=\frac{(z+1)(z-2)}{(z+10)(z-1)}$ の $(50,50)$ *Padé* 近似を計算する．表 *2* に示すように，精度をあげていくと *Padé* 近似の次数が安定して，入力の有理関数の次数と一致するという結果が得られた．

表 2: 例 2 の計算結果

計算精度	$\deg([m,n]_f)$	$\deg([n,m]_g)$	$zr([m,n]_f,[n,m]_g)$
19	$[19,1]$	$[42,43]$	$\neq 0$
38	$[38,1]$	$[2,2]$	$\neq 0$
57	$[44,44]$	$[2,2]$	$\neq 0$
77	$[24,24]$	$[2,2]$	$\neq 0$
96	$[5,5]$	$[2,2]$	$\neq 0$
115	$[2,2]$	$[2,2]$	$=0$

表 *2* 中では，*2* つの有理関数の分母同士の積と分子同士の積の差に対してゼロ書き換えを行う関数を $zr([m,n]_f,[n,m]_g)$ と定義する．つまり $[m,n]_f=p/q,[n,m]_g=r/s$ とすると，$pr-qs$ を求め，係数の区間数が 0 を含んでいるならその係数を 0 に置き換える．$zr([m,n]_f,[n,m]_g)=0$ なら *Duality* を満たすものが得られたことが確認できる．

表 *2* より，計算精度 *19* 桁のとき，$[m,n]_f$ と $[n,m]_g$ の次数が異なることから正しい近似が得られていない．また，計算精度を $38\sim96$ 桁に上げたとき，$[n,m]_g$ の次数は正しい次数となっているが，$zr([m,n]_f,[n,m]_g)\neq 0$ となっているため，正しい近似が得られていない．さらに，計算精度を *115* 桁に上げたとき，$zr([m,n]_f,[n,m]_g)=0$ となるため，計算精度 *115* 桁で正しい近似を得られたと判定できる．

また， *Duality* を用いた提案手法の判定が正しく動作するかを，m,n の値を変更し実験することで確認する．その結果を表 *3* に示す．ここでは $u=[m,n]_f,v=[n,m]_g$ とする．

表 3: 例 2 の関数について (m,n) の値を変更した場合の計算結果

$[m,n]$	$[10,10]$		$[15,15]$		$[20,20]$		$[30,30]$	
計算精度	$\deg(u)$	$\deg(v)$	$\deg(u)$	$\deg(v)$	$\deg(u)$	$\deg(v)$	$\deg(u)$	$\deg(v)$
19	$\mathbf{[2,2]}$	$\mathbf{[2,2]}$	$[12,12]$	$[2,2]$	$[19,1]$	$[2,2]$	$[19,1]$	$[2,2]$
38			$\mathbf{[2,2]}$	$\mathbf{[2,2]}$	$[3,3]$	$[2,2]$	$[23,23]$	$[2,2]$
57					$\mathbf{[2,2]}$	$\mathbf{[2,2]}$	$[4,4]$	$[2,2]$
77							$\mathbf{[2,2]}$	$\mathbf{[2,2]}$

表 3 中の太字の要素は $zr([m,n]_f,[n,m]_g)=0$ となった要素を表す．表 3 より，得られる次数に規則性は見られないが，実験結果として Duality により収束判定ができていることがわかる．

4 結論

本研究では，近似する関数が与えられた場合，拡張ユークリッド互除法を用いて Padé 近似の関数形を求める問題について検討した．浮動小数点数を用いて計算を行う場合，Padé 近似のアルゴ

リズムが正しい次数の近似を与えない．そこで安定化理論を導入することによりアルゴリズムを安定化できることを確認した．また，Padé 近似が満たすべき性質 Duality を用いることで，いつ真の解が得られたかを評価できることを確認した．

今後の課題としては，以下のようなことが挙げられる．

- 安定化理論を用いた Padé 近似アルゴリズムと Ibryaeva らの手法との計算時間の比較
- べき級数のみが与えられた場合 (誤差が含まれている場合) の妥当な処理の検討

参考文献

[1] K.Shirayanagi and M. Sweedler: A Theory of Stabilizing Algebraic Algorithms, Technical Report 95-28, Mathematical Sciences Institute, Cornell University, pp.1-92, 1995.

[2] O.L. Ibryaeva, V.M. Adukov: An algorithm for computing a Padé approximant with minimal degree denominator, Journal of Computational and Applied Mathematics, Vol.237 Issue 1, pp. 529-541, 2013.

[3] K.O. Geddes: Symbolic Computation of Padé Approximants, ACM Transactions on Mathematical Software, Vol.5, Issue 2, pp.218-233, 1979.

[4] S. R. Czapor, K.O. Geddes: A Comparison of Algorithm for the Symbolic Computation of Padé Approximants, Department of Applied Mathematics, 1984.

[5] George A. Baker, Jr. Peter Graves-Morris: Padé approximants 2nd edition, cambridge, 1996.

[6] R.J. McEliece and J.B. Shearer: A property of Euclid's algorithm and an application to Padé approximation, SIAM J. Appl. Math. 34, 4, 611-617, 1978.

[7] R.P. Brent, F.G. Gustavson, and D.Y.Y. Yun, Fast Solution of Toeplitz Systems of Equations and Computation of Padé Approximants, Journal of Algorithms 1, 259-233, 1980.