バーンスタイン基底関数を用いた近似GCDの評価について

GCD with Bernstein basis[*1]

神戸大学 大学院 人間発達環境学研究科　　長坂 耕作 [*2]
Kosaku Nagasaka
Graduate School of Human Development and Environment, Kobe University

Abstract

In this talk, we focus on computing approximate GCD of polynomials in the power form but their perturbation is measured by the Euclidean norm of perturbation polynomials in the Bernstein form, and the rational function approximation by this approximate GCD.

1 はじめに

本稿では，有理関数近似や Padé 近似などの，線形ないしは非線形制約を解き有理式を求める操作を浮動小数点数を用いて行うことを考える。このとき得られた有理式は，計算誤差の影響により精度や次数などの面で，厳密な計算結果とは異なることになる。このような誤差を含む有理式に対しても，誤差を考慮した近似 GCD を用いることで約分を行うことが可能であり，甲斐と野田による Hybrid Rational Function Approximation (HRFA) [KN00] などの先行研究が知られている。本稿では，HRFA で採用されている近似 GCD による誤差を含む有理式の約分操作を，更に発展させる研究について取りあげる。以下では，その応用先として考えられる有理関数近似と Padé 近似について概観しておく。

有理関数近似は，データ列 $\{(\lambda_i, f_i)\}_{i=1}^{N}$ に対して，次式の有理関数 $r(x)$ を求める問題である。

$$\sum_{i=1}^{N} |f_i - r(\lambda_i)|^2 \quad \to \quad minimized$$

この最適化は非凸となっており，直接解くことが出来ないため，幾つかの方法が研究されている。例えば，Sanathanan と Koerner による Iterative Reweighting[SK63] は，分母をはらい線形化した問題を逐次的に解く方法である。一方，単項式基底（$1, x, x^2, \ldots$）の多項式による有理式ではなく，その他の表現方法を用いる研究も行われており，Vector Fitting[Gus06] や RKFIT[BG17] などが挙げられる。

Padé 近似は，関数 $f(x)$ の級数展開から，$f(x)$ を有理関数で近似するものであり，$f(x)$ の (m,n) Padé 近似とは，

$$f(x)q(x) - p(x) = r_{m+n+1}x^{m+n+1} + r_{m+n+2}x^{m+n+2} + \cdots$$

なる有理関数 $p(x)/q(x)$ ($\deg(p) \le m$, $\deg(q) \le n$) となる。この問題は制約条件に基づく線形方程式により解くことができる。しかしながら，Padé 近似を浮動小数点数を用いて求めると，計算誤差の関係から Froissart doublets と呼ばれる分子分母の共通零点が生じてしまう。そのため，特異値分解を用いて，この問題を回避するための先行研究が幾つか行われている [GGT13, IA13]。

[*1] This work was supported by JSPS KAKENHI Grant Number 19K11827.
[*2] E-mail: nagasaka@main.h.kobe-u.ac.jp

1.1 近似 GCD による約分操作

本稿での近似 GCD による約分操作をある程度定義しておく。$r(x) = p(x)/q(x)$ を与えられた 1 変数の有理関数とし，分子 $p(x)$ と分母 $q(x)$ は互いに素とする。このとき，$p(x)$ を僅かに摂動させ $p(x) + \delta_p(x)$ に，$q(x)$ を僅かに摂動させ $q(x) + \delta_q(x)$ に変化させることで，共通因子 $d(x)$ を除して，約分結果となる以下の $\tilde{p}(x)/\tilde{q}(x)$ を得るのが目的である。

$$r(x) \approx \frac{p(x) + \delta_p(x)}{q(x) + \delta_q(x)} = \frac{\tilde{p}(x)d(x)}{\tilde{q}(x)d(x)} = \frac{\tilde{p}(x)}{\tilde{q}(x)}$$

このとき，各多項式はすべて単項式基底（$1, x, x^2, \ldots$）で表現されるものとする（幅広く採用されている，通常の多項式の表現方法がこれにあたる）。

HRFA でも採用されている近似 GCD による約分操作であるが，この方法の課題は，約分前と約分後の関数の値の変動である。近似 GCD は多くの場合，係数の摂動（2-norm など）を最小化しており，多項式の変数に値を代入した際の変動（L_2-norm に対応）は考慮されていない。そのため，関数の近似を求めているはずが，本来の関数の取りうる値からのズレを大きくしてしまう可能性が，これまでの近似 GCD による約分操作にはある。

2 Bernstein 基底の活用

本稿では前述の課題を解決するため，単項式基底だけでなく，Bernstein 基底をも活用する。Bernstein 基底を用いた多項式の表現は，次のようになる（$B_0^m, B_1^m, \ldots, B_m^m$ が基底多項式）。

$$f(x) = \sum_{i=0}^{m} a_i B_i^m(x) \ \ (x \in [0, 1]), \ \ B_i^m(x) = \binom{m}{i}(1-x)^{m-i}x^i$$

Bernstein 基底は様々な性質 [Far12] を持っているが，特に近似 GCD の観点からは，次が挙げられる。

$$\forall x \in [0, 1], \ \min_i a_i \le f(x) \le \max_i a_i$$

ただし，その一方で，単項式基底と Bernstein 基底との間の変換行列は悪条件であることが知られており，その条件数は次のように大きい。

$$\begin{array}{rcll} \|M\|_1\|M^{-1}\|_1 = \|M\|_\infty\|M^{-1}\|_\infty & = & (m+1)\binom{m}{\nu}2^\nu & \left(\nu = \left\lfloor \frac{2(m+1)}{3} \right\rfloor\right) \\ & \approx & 3^{m+1}\sqrt{(m+1)/4\pi} & \end{array}$$

このような性質を持つ Bernstein 基底の近似 GCD との関係については先行研究が行われており，Bernstein 基底で表現された多項式の部分終結式行列が Winkler ら [Yan13, WG03] により提案されているが，その近似 GCD の定義は特殊で，一般的な係数ベースの近似 GCD とは異なる。本稿では，これらの論文で提案されている，次式で定義される部分終結式行列に関する議論のみを活用する。

改めて，与えられた 2 つの多項式 $f(x)$ と $g(x)$ は，次の Bernstein 基底での表現を持つとする。

$$f(x) = \sum_{i=0}^{m} a_i B_i^m(x), \ g(x) = \sum_{i=0}^{n} b_i B_i^n(x), \ B_i^m(x) = \binom{m}{i}(1-x)^{m-i}x^i$$

このとき，これら $f(x)$ と $g(x)$ の部分終結式行列は，次のようにスケーリングする行列 D_ℓ^{-1} や Q_k を用いて，次式で与えられる。

$$T_k(f,g) = \begin{pmatrix} a_0\binom{m}{0} & & & b_0\binom{n}{0} & & \\ a_1\binom{m}{1} & \ddots & & b_1\binom{n}{1} & \ddots & \\ \vdots & \ddots & a_0\binom{m}{0} & \vdots & \ddots & b_0\binom{n}{0} \\ a_{m-1}\binom{m}{m-1} & \ddots & a_1\binom{m}{1} & b_{n-1}\binom{n}{n-1} & \ddots & b_1\binom{n}{1} \\ a_m\binom{m}{m} & \ddots & \vdots & b_n\binom{n}{n} & \ddots & \vdots \\ & \ddots & a_{m-1}\binom{m}{m-1} & & \ddots & b_{n-1}\binom{n}{n-1} \\ & & a_m\binom{m}{m} & & & b_n\binom{n}{n} \end{pmatrix}$$

$$D_\ell^{-1} = \mathrm{diag}\left(\binom{\ell}{0}^{-1} \quad \binom{\ell}{1}^{-1} \quad \cdots \quad \binom{\ell}{\ell-1}^{-1} \quad \binom{\ell}{\ell}^{-1} \right)$$

$$Q_k = \mathrm{diag}\left(\binom{n-k}{0} \quad \cdots \quad \binom{n-k}{n-k} \quad \binom{m-k}{0} \quad \cdots \quad \binom{m-k}{m-k} \right)$$

$$\left(D_{m+n-k}^{-1} T_k(f,g) Q_k\right) \left(v_{k,0} \ \cdots \ v_{k,n-k} \ -u_{k,0} \ \cdots \ -u_{k,m-k}\right)^t = \vec{0}$$

2.1 近似 GCD の計算手順

本稿では，単項式基底で表現された多項式の近似 GCD を，前述の Bernstein 基底での部分終結式行列を用いて求めることになる。このアプローチには，大きく分けると次の 2 つの方法が存在する。

Bernstein 基底に変換して近似 GCD

与えられた $p(x)$, $q(x)$ を単項式基底から Bernstein 基底での表現に変換し，Bernstein 基底での表現における近似 GCD を用いて，約分結果の $\tilde{p}(x)$, $\tilde{q}(x)$ を求める。そして，最後に計算結果を単項式基底での表現に再変換する。

Bernstein 基底に変換しないで近似 GCD

近年の近似 GCD アルゴリズムは，目的関数と制約条件を構成し，最適化を行うことで求めるものが多い。そのため，制約条件などは単項式基底での表現を採用しつつも，目的関数に関しては Bernstein 基底での表現に変換したものを用いる，という方法が考えられる。

3 計算実験の結果

本稿では有理関数近似における近似 GCD の有用性の観点から実験を行った結果を報告する。実験は，次数 (m, n)，評価点数 N，誤差上界 ε とし，(m, n) 次の有理関数をランダムに生成した。このとき，それぞれの有理関数 $p(x)/q(x)$ は，$q(0) = 1$ を満たし，残りの係数は，$[-1, 1] \setminus \{0\}$ からランダムに選択した。これらの有理関数を近似するためのサンプリングデータの生成は，評価点を等間隔に $\lambda_1, \ldots, \lambda_N \in [0, 1]$ と取り，サンプリング結果の関数の値 $f_1, \ldots, f_N$ は，e_i を $[-1, 1]$ からランダム生成することで，次式のように誤差を交えた。

$$f_i = p(\lambda_i)/q(\lambda_i) + \varepsilon \times e_i$$

実験に用いたアルゴリズムは，指定された誤差の許容度の範囲内でなるべく有理関数の次数を下げることを目的とし，次の 7 種類用意した。近似 GCD 自体は，UVGCD[Zen11] を用いた。

特異値分解で次数探索の直接的方法

- **SVD**: 許容度から出るまで，次数を削減し解く
- **LSVD**: 許容度内に入るまで，次数を増やして解く
- **LSVDRW**: **LSVD** + Iterative Reweighting

近似 GCD の次数探索の計算代数的方法

- **UVGCDS**: 許容度から出るまで，近似 GCD の次数を増やす
- **BSFUVGCDS**: Bernstein form で **UVGCDS**
- **BSTUVGCDS**: 目的関数だけ Bernstein form で **UVGCDS**
- **BSFUVGCDRW**: **BSFUVGCDS** + Iterative Reweighting

次数 $(m, n) = (23, 24)$，評価点数 $N = 61$，誤差上界 $\varepsilon = 1.0e\text{-}4$ として，計算結果の許容度は $1.0e\text{-}3$ とした（誤差の 2-norm）。近似すべき有理関数の最大次数は $(23, 24)$ であり，単項式基底と Bernstein 基底間の変換行列の条件数は $(24+1)\binom{24}{16}2^{16} = 1204995686400$ であった。Mathematica の倍精度浮動小数点数相等の計算により求めた 100 セットの平均次数は，次のとおりであった。

- **SVD**: 29.99
- **LSVD**: 17.725
- **LSVDRW**: 6.485
- **UVGCDS**: 24.88
- **UVGCDRW**: 23.51
- **BSFUVGCDS**: 14.87
- **BSFUVGCDRW**: 10.53
- **BSTUVGCDS**: 21.74
- **BSFSTLNGCDS**: 15.6
- **BSFSTLNGCDRW**: 12.03
- **LSVDRW+BSFUVGCDS**: 5.675

以上の結果から，条件数は大きいが，一旦 Bernstein 基底での表現に直してから，近似 GCD を求め約分してから，再度単項式基底での表現に戻す方法が，近似 GCD を用いる中では良いことが判明した。

参 考 文 献

[BG17] Mario Berljafa and Stefan Güttel. The RKFIT algorithm for nonlinear rational approximation. *SIAM J. Sci. Comput.*, 39(5):A2049–A2071, 2017.

[Far12] Rida T. Farouki. The Bernstein polynomial basis: a centennial retrospective. *Comput. Aided Geom. Design*, 29(6):379–419, 2012.

[GGT13] Pedro Gonnet, Stefan Güttel, and Lloyd N. Trefethen. Robust Padé approximation via SVD. *SIAM Rev.*, 55(1):101–117, 2013.

[Gus06] B. Gustavsen. Improving the pole relocating properties of vector fitting. *IEEE Transactions on Power Delivery*, 21(3):1587–1592, July 2006.

[IA13] O. L. Ibryaeva and V. M. Adukov. An algorithm for computing a Padé approximant with minimal degree denominator. *J. Comput. Appl. Math.*, 237(1):529–541, 2013.

[KN00] Hiroshi Kai and Matu-Tarow Noda. Hybrid rational function approximation and its accuracy analysis. In *Proceedings of the International Conference on Rational Approximation, ICRA 99 (Antwerp)*, volume 6, pages 429–438, 2000.

[SK63] C. Sanathanan and J. Koerner. Transfer function synthesis as a ratio of two complex polynomials. *IEEE Trans. Autom. Control*, 8(1):56–58, 1963.

[WG03] Joab R. Winkler and Ronald N. Goldman. The Sylvester resultant matrix for Bernstein polynomials. In *Curve and surface design (Saint-Malo, 2002)*, Mod. Methods Math., pages 407–416. Nashboro Press, Brentwood, TN, 2003.

[Yan13] Ning Yang. *Structured matrix methods for computations on Bernstein basis polynomials.* PhD thesis, University of Sheffield, England, 2013.

[Zen11] Zhonggang Zeng. The numerical greatest common divisor of univariate polynomials. In *Randomization, relaxation, and complexity in polynomial equation solving*, volume 556 of *Contemp. Math.*, pages 187–217. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2011.