数理解析研究所講究録
990 巻 1997 年 250-258

Laurent-Padé 近似におけるブロック構造について

筑波大学電子・情報工学系　櫻井鉄也 (Tetsuya Sakurai)

1　はじめに

関数 $f(z)$ に対する分子が m 次, 分母が n 次の Padé 近似式

$$r_n^{(m)}(z)=p_n^{(m)}(z)/q_n^{(m)}(z)$$

は, 条件

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

を満たし正規化条件 $q_n^{(m)}(0)=1$ となるように分子, 分母の多項式 $p_n^{(m)}(z)$, $q_n^{(m)}(z)$ を決める. このとき分母を求めるための条件はHankel行列を係数行列とする連立一次方程式に帰着し, 分子とは独立に求めることができる [1]. 同様に無限遠点での Padé 近似や Laurent 級数に対する Padé 近似 [1, 2] においても分母を求める条件式は Hankel 行列(あるいは Toeplitz 行列) を係数行列とする連立一次方程式となる.

この Hankel 行列が正則のとき Padé 近似式は一意に求められるが, 正則でないときには分子と分母に共通因子が現われ, より次数の低い Padé 近似式と一致する. 図1のように分子, 分母の次数がそれぞれ $0,1,2,\cdots$ の Padé 近似式を並べて表にしたものを Padé 表と呼ぶが, 表中の要素がより低い次数の Padé 近似式と一致したときには表中に同じ式が現われることになる. このような同じ式は長方形の領域として現われるため, これをブロック構造と呼ぶ.

多くの場合 Padé 近似式は連立一次方程式を直接には解かず, より次数の低い近似式を基にして漸化式によって順に次数の高い近似式を求める. このときブロック構造があると漸化式が進まなくなる. これを breakdown と呼ぶ. Hankel 行列が正則ではあっても数値的にはランク落ちに近い場合が起こりうる. このような場合に漸化式によって順に近似式を求めていくと, 桁落ちを起こし数値的な不安定性の原因となる. このような状況は near-breakdown と呼ばれており, この桁落ちを引き起こす Padé 表中の要素の計算を避けて誤差の蓄積を防ぐ方法が提案されている [3]. このとき計算途中でいつ near-breakdown が起きているか, どの要素の計算を避ければよいかの判定が問題となる. 本論文ではこのような漸化式を用いた近似式の計算における誤差の挙動について考察する.

2　有理近似式と Hankel 行列

ここでは $f(z)$ が

$$f(z)=\sum_{i=0}^{\infty}\mu_i z^{-i-1}$$

$$
\begin{array}{c|ccccc}
 & & & m & & \\
\hline
 & r_0^{(0)} & r_0^{(1)} & r_0^{(2)} & r_0^{(3)} & \cdots \\
n & r_1^{(0)} & r_1^{(1)} & r_1^{(2)} & r_1^{(3)} & \cdots \\
 & r_2^{(0)} & r_2^{(1)} & r_2^{(2)} & r_2^{(3)} & \cdots \\
 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots
\end{array}
$$

図 1: Padé 表

のように与えられたときに，分子，分母の次数がそれぞれ $n-1$ 次，n 次の無限遠点でのPadé 近似式を求める場合について考えることにする．分子を $p_n(z)$, 分母を $q_n(z)$ と表わす．このときの p_n, q_nが満たすべき条件は

$$
\begin{cases} q_n(z)f(z) = p_n(z) + O_-(z^{-n-1}) \\ \deg p_n(z) = n-1, \quad \deg q_n(z) = n \end{cases}
$$

となる．ここで記号 $\deg p$ は多項式 p の次数を表わし，$O_-(z^k)$ は z^kの項以下の次数の項があることを表わす.

この条件式は分母に関しては

$$
C_i(q_n(z)f(z)) = 0 \quad (-n \le i \le -1) \tag{1}
$$

となる．ここで記号 $C_i(f(z))$ は $f(z)$ の i 次の係数を表わすものとする．正規化のため $q_n(z)$ はモニックとし

$$
q_n(z) = \sum_{i=0}^{n} \rho_{i,n} z^i, \quad \rho_{n,n} = 1
$$

とおく.

$$
\mathrm{H}_n = \mathrm{H}_n(f) := \begin{bmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \cdots & \mu_{n-1} \\ \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_n \\ \vdots & & & \vdots \\ \mu_{n-1} & \mu_n & \cdots & \mu_{2n-1} \end{bmatrix},
$$

$$
\boldsymbol{h}_n(f) := [\mu_n \ \mu_{n+1} \ \ldots \ \mu_{2n}]^T,
$$

$$
\boldsymbol{q}_n := [\rho_{0,n} \ \cdots \ \rho_{n-1,n}]^T
$$

とおくと，式 (1) は

$$
\mathrm{H}_n(f)\boldsymbol{q}_n = \boldsymbol{h}_n(f)
$$

と表わされる．行列 H_nは$\mu_0, \mu_1, \ldots$ が規則的に並んでおり，このような行列は Hankel 行列と呼ばれている.

被近似関数 $f(z)$ の係数μ_iがある線形汎関数$\Phi(z)$ によって

$$
\mu_i = \Phi(z^i), \quad i = 0, 1, \ldots
$$

で与えられるものとする．このとき式(1)から

$$\Phi(z^k q_n) = 0, \quad k = 0, 1, \ldots, n-1$$

が得られる．これは$\Phi(z)$の線形性から

$$\Phi(q_k q_n) = 0, \quad k = 0, 1, \ldots, n-1$$

となり，このため$\{q_n\}$は形式的直交多項式と呼ばれる．

このような条件を満たす多項式$\{q_n\}$とLanczos法との関係について触れる．ある行列Aとベクトルb，および任意のゼロでないベクトルx_0とyが与えられたとする．ベクトルx_nは

$$x_n - x_0 \in \mathrm{span}(r_0, Ar_0, \ldots, A^{n-1}r_0)$$

を満たすとすると残差r_nは行列Aの多項式$Q_n(A)$によって

$$r_n = b - Ax_n = Q_n(A)r_0$$

と表わせる．

さらにr_nは次式のような直交条件

$$r_n \perp \mathrm{span}(y, A^* y, \ldots, (A^*)^{n-1} y)$$

を満たすように選ぶものとする．ここで記号A^*は行列Aの共役転置を表わす．このとき

$$\Phi(z^k) := (y, A^k r_0), \quad k = 0, 1, \ldots, \tag{2}$$

とおくと，直交条件は

$$\Phi(z^k Q_n) = 0, \quad k = 0, 1, \ldots, n-1$$

と表わせる．これより残差多項式$Q_n(z)$は式(2)から係数が与えられる場合の無限遠点でのPadé近似の分母と等価であり，両者の計算の不安定性にも共通の問題がある．

3 漸化式による計算

漸化式により(p_n, q_n)から(p_{n+1}, q_{n+1})を求めるときには，これに付随して(a_n, b_n)，(g_n, f_n)を求める．より一般的に(p_n, q_n)から(p_{n+k}, q_{n+k}) $(k \geq 1)$を求める漸化式を示す[3]．これは

$$\begin{bmatrix} a_{n+k} & p_{n+k} \\ b_{n+k} & q_{n+k} \\ g_{n+k} & f_{n+k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_n & p_n \\ b_n & q_n \\ g_n & f_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_k^{(n)} & u_k^{(n)} \\ t_k^{(n)} & v_k^{(n)} \end{bmatrix}$$

となる．ここで漸化式の係数$s_k^{(n)}$, $t_k^{(n)}$, $u_k^{(n)}$, $v_k^{(n)}$は

$$\mathrm{S}_k(g_n, f_n) := \begin{bmatrix} \mathrm{H}_k(z^{n-k} g_n) & \mathrm{H}_k(z^{n-k} f_n) \\ \mathrm{H}_k(z^n g_n) & \mathrm{H}_k(z^n f_n) \end{bmatrix}, \tag{3}$$

$$\boldsymbol{e}_{2k} := [0 \ \ldots \ 0 \ 1]^T \in \mathcal{R}^{2k}$$

とし,

$$\mathrm{S}_k(g_n, f_n) \begin{bmatrix} s_k^{(n)} & u_k^{(n)} \\ t_k^{(n)} & \dot{v}_k^{(n)} \end{bmatrix} = [\boldsymbol{e}_{2k} \ \boldsymbol{h}_{2k}(z^n f_n)]$$

を解いて得られる. ここで$\dot{v}_k^{(n)}$は $v_k^{(n)}$の最高次の項を取り除いたものである.

初期値は

$$\begin{bmatrix} a_0 & p_0 \\ b_0 & q_0 \\ g_0 & f_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & f(z) \end{bmatrix}$$

のように選ぶ.

特に $k = 1$ のときには従来の Padé 近似を求める漸化式と一致し,

$$f_n(z) = \sum_{i=1}^{\infty} \phi_{i,n} z^{-n-i}, \quad g_n(z) = \sum_{i=0}^{\infty} \gamma_{i,n} z^{-n-i}$$

とおくと

$$\begin{bmatrix} s_1^{(n)} & u_1^{(n)} \\ t_1^{(n)} & \dot{v}_1^{(n)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -\phi_{1,n} \\ \dfrac{1}{\phi_{1,n}} & \gamma_{1,n} - \dfrac{\phi_{2,n}}{\phi_{1,n}} \end{bmatrix}$$

と表わせる.

4 ブロック構造

ブロック構造が現われず, すべての $q_n(z)$ が求められるときには明らかに

$$\mathrm{H}_n \neq 0, \quad n = 1, 2, \ldots$$

である. $q_n(z)$ を先頭とする大きさ m のブロックが現われたときには式 (1) を満たす n 次の多項式 $q_n(z)$ はさらに

$$C_i(q_n(z) f(z)) = 0 \quad (-n - m + 1 \leq i \leq -n - 1)$$

を満たす. このとき H_nは

$$\det \mathrm{H}_{n+1} = \cdots = \det \mathrm{H}_{n+m-1} = 0$$

となる.

Hankel 行列 H_nが 0 ではないが小さくなるような場合には, $k = 1$ として順に漸化式を用いて求めると数値的不安定性が見られる. このような near-breakdown を扱うために本論文では行列式の値が小さいようなブロックが現われた場合を考え,

$$\det \mathrm{H}_n = O(1), \quad \det \mathrm{H}_{n+m} = O(1)$$

$$\det \mathrm{H}_{n+i} = O(\epsilon), \quad i = 1, \ldots, m-1$$

となるときに，これを $q_n(z)$ を先頭とする大きさ m のブロックと呼ぶことにする．ここでϵは十分に小さいものとする．

ここで漸化式の計算に現われる q_n, f_n, g_n等の具体的な表記を与える．$q_n(z)$ の係数が満たす連立一次方程式から Cramer の方法により

$$q_n(z) = \begin{vmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \cdots & \mu_n \\ \vdots & & & \vdots \\ \mu_{n-1} & \mu_n & \cdots & \mu_{2n-1} \\ 1 & z & \cdots & z^n \end{vmatrix} / \det \mathrm{H}_n$$

を得る．また，これより

$$p_n(z) = \begin{vmatrix} \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_n \\ \vdots & & & \vdots \\ \mu_n & \mu_{n+1} & \cdots & \mu_{2n-1} \\ \mu_0 & \mu_0 z + \mu_1 & \cdots & \sum_{i=0}^{n-1} \mu_i z^{n-i-1} \end{vmatrix} / \det \mathrm{H}_n,$$

$$f_n(z) = q_n(z) f(z) - p_n(z) = \sum_{i=0}^{\infty} z^{-n-i-1} \begin{vmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \cdots & \mu_n \\ \vdots & & & \vdots \\ \mu_{n-1} & \mu_n & \cdots & \mu_{2n-1} \\ \mu_{n+i} & \mu_{n+i+1} & \cdots & \mu_{2n+i} \end{vmatrix} / \det \mathrm{H}_n$$

を得る．また，$i = 0$ のときをみると

$$\mathrm{lc}\,(f_n) = \det \mathrm{H}_{n+1} / \det \mathrm{H}_n$$

となることがわかる．ここで $\mathrm{lc}\,(f)$ は fの最高次の係数を表わすものとする．fが多項式でなく負べきの項を持つ場合でも便宜上同じ記号を用いることにする．

特に $k = 1$ のときには

$$a_n(z) = p_{n-1}(z)/\mathrm{lc}\,(f_{n-1})$$

$$b_n(z) = q_{n-1}(z)/\mathrm{lc}\,(f_{n-1})$$

$$g_n(z) = f_{n-1}(z)/\mathrm{lc}\,(f_{n-1})$$

となる．第 n ステップから $n+1$ ステップの要素を求める漸化式は

$$p_{n+1} = -\phi_{1,n} a_n + (z - (\gamma_{1,n} - \phi_{2,n}/\phi_{1,n})) p_n$$

$$q_{n+1} = -\phi_{1,n} b_n + (z - (\gamma_{1,n} - \phi_{2,n}/\phi_{1,n})) q_n$$

$$f_{n+1} = -\phi_{1,n} g_n + (z - (\gamma_{1,n} - \phi_{2,n}/\phi_{1,n})) f_n$$

と表わせる．また，

$$\phi_{1,n} = \mathrm{lc}\,(f_n) = \frac{\det \mathrm{H}_{n+1}}{\det \mathrm{H}_n},$$

$$\gamma_{1,n} = \phi_{1,n-2}\frac{\det \mathrm{H}_{n-1}}{\det \mathrm{H}_n}$$

を得る．

これらの結果から $\det \mathrm{H}_{n+1}/\det \mathrm{H}_n$ のように相隣り合う Hankel 行列の行列式の比が漸化式に現われることがわかる．また，p_n, q_n, f_n などはすべて $1/\det \mathrm{H}_n$ が掛かっている．行列式 $\det \mathrm{H}_{n+k} = O(\epsilon)$, $k = 1, 2, \ldots, m-1$ となるような q_n を先頭とする大きさ m のブロックが現われたときには，

$$\det \mathrm{H}_{n+m}/\det \mathrm{H}_{n+m-1} = O(1/\epsilon)$$

となり，ブロックの最後の要素から次のブロックの外の要素を求めるときに漸化式中において $1/\epsilon$，あるいはその積 $1/\epsilon^2$ 程度の値が現われることになる．ブロックの外にある q_{n+m} はそれほど大きな値とはならないことから，この計算において大きな桁落ちが起こることが予想される．

5 数値例

ここでいくつかの数値例によって漸化式で求めた $q_n(z)$ の係数の誤差を数値的に確かめる．計算は Mathematica で行い，倍精度演算で求めた q_n の誤差は多倍長演算で求めた q_n^* を用いて

$$errq_n := \frac{\|q_n - q_n^*\|_\infty}{\|q_n^*\|_\infty}$$

によって見積もった．比較のために連立一次方程式を直接解いた場合の誤差も求めた．

表 1 ではブロックサイズが 2 の場合の結果を示す．μ_i, $i = 0, 1, \ldots$ は順に

$$1, 1+\epsilon, 1-\epsilon\sqrt{3}, 1/2, 1/2+\epsilon, 1/8, -1/5, 1/2, 1/11, 1/3, -1/11$$

とした．ここで $\epsilon = 10^{-5}$ とした．$n = 1, 2$ のときがブロックになっている．表では q_{n+1} の計算に現われる b_n, q_n, $u_k^{(n)}$, $v_k^{(n)}$ の係数の絶対値最大の値もあわせて示した．$-\infty$ は全桁合っていることを意味している．

漸化式で求めたときにブロック中での精度は連立一次方程式を解いた場合とほぼ同程度の精度である．しかし，ブロックのつぎの要素である $n = 3$ のときには本来精度良く求められるはずであるが，漸化式で求めたときには誤差が拡大していることがわかる．このとき q_3 を求めるために用いられた b_2, q_2, $v_1^{(2)}$, $u_1^{(2)}$ の係数は大きな値となっているが，q_3 の係数は大きくなっていない．

表 2 ではブロックサイズが 4 の場合の結果を示す．μ_i, $i = 0, 1, \ldots$ は順に

$$1, 1+\epsilon, 1-\epsilon\sqrt{3}, 1, 1, 1/2, 1/2+\epsilon, 1/4, 1/8, -1/5, 1/2, 1/11, 1/3, -1/11$$

とした．$n = 1, 2, 3, 4$ がブロックである．この場合にもブロックのつぎの要素 q_5 において大きな誤差がみられる．

表 3 では，一旦 $n = 4$ まで求めてから，改めて $n = 1$ の要素から $k = 4$ としてブロックを飛び越えて $n = 5$ 以降を求めた結果を示す．この場合には漸化式で求めた場合でも

表 1: ブロックサイズ 2

	$\log_{10}\|\|err\,q_n\|\|$		$\log_{10}\|\|\cdot\|\|$			
n	行列	漸化式	b_n	q_n	$u_k^{(n)}$	$v_k^{(n)}$
1	$-\infty$	$-\infty$	0.0	0.0	−4.4	4.1
2	−12.6	−12.7	4.4	4.1	3.8	4.1
3	−17.1	−7.3	0.3	−0.1	−0.3	0.1
4	−15.8	−7.6	0.3	0.2	0.1	0.2
5	−15.9	−7.6	0.1	0.2	−0.1	0.2

表 2: ブロックサイズ 4

	$\log_{10}\|\|err\,q_n\|\|$		$\log_{10}\|\|\cdot\|\|$			
n	行列	漸化式	b_n	q_n	$u_k^{(n)}$	$v_k^{(n)}$
1	$-\infty$	$-\infty$	0.0	0.0	−4.4	0.1
2	−12.7	−12.1	4.4	0.1	−4.4	4.1
3	−12.6	−11.9	4.5	4.2	3.8	4.1
4	−12.6	−12.1	0.4	4.1	3.8	0.1
5	−15.8	−7.5	0.3	−0.2	−0.3	0.0
6	−15.9	−8.0	0.3	0.3	−0.5	0.0

ほぼ連立一次方程式を解いた場合と同様の精度を維持しており，ブロックの回避が計算精度の保持に有効であることがわかる．

つぎに精度が徐々に変化する場合に，1 ステップずつ求めた場合と途中でブロックを回避した場合の結果を表 4 に示す．$\mu_i,\ i=0,1,\ldots$ は

$$(-1)^{i+1}\sum_{j=1}^{15}(j+0.1)^{-i-1}+\sqrt{i}\epsilon,\quad i=0,1,\ldots$$

とした．

$n=2$ から徐々に精度が悪くなり near-breakdown の状況になっている．しかし $n=8$ までの間は漸化式で求めた場合でも連立一次方程式を直接解いた場合とほぼ同様の精度が得られている．逆に直接解いた場合に精度が良くなりはじめる $n=9$ から漸化式で求めた場合に大きな誤差が現われている．$n=5$ から途中をとばして $n=10$ を求めると誤差が大きくなる現象は見られない．

表 3: ブロックサイズ 4，途中でブロックを回避した場合

	$\log_{10}\|\|err q_n\|\|$		$\log_{10}\|\|\cdot\|\|$			
n	行列	漸化式	b_n	q_n	$u_k^{(n)}$	$v_k^{(n)}$
1	$-\infty$	$-\infty$	0.0	0.0	−4.4	0.1
2	−12.7	–	4.4	0.1	−4.4	4.1
3	−12.6	–	4.5	4.2	3.8	4.1
4	−12.6	–	0.4	4.1	3.8	0.1
5	−15.8	−15.3	0.3	−0.2	−0.3	0.0
6	−15.9	−15.5	0.3	0.3	−0.5	0.0

表 4: 徐々に精度が悪化するとき

	$\log_{10}\|\|err q_n\|\|$			$\log_{10}\|\|\cdot\|\|$			
n	行列	漸化式	途中回避	b_n	q_n	$u_k^{(n)}$	$v_k^{(n)}$
1	$-\infty$	$-\infty$	$-\infty$	−0.5	0.0	−0.5	0.0
2	−16.6	−15.7	−15.7	0.5	0.0	−1.9	0.0
3	−14.5	−14.7	−14.7	1.9	−0.2	−2.5	0.1
4	−13.9	−13.9	−13.9	2.7	−0.2	−3.3	0.0
5	−12.8	−12.8	−12.8	3.4	−0.9	−4.3	0.0
6	−11.9	−11.9	–	4.3	−0.9	−5.4	0.0
7	−10.8	−10.6	–	5.5	−1.7	−6.4	5.7
8	−10.9	−10.1	–	6.5	4.0	5.0	5.7
9	−11.3	−8.9	–	0.8	3.9	4.1	0.0
10	−12.3	−7.8	−12.6	0.8	2.7	3.0	0.0
11	−12.8	−6.9	−13.5	0.7	2.4	2.0	0.0

6 おわりに

本論文では漸化式によって順に Padé 近似式を求めていくときに現われる各式を行列式を用いて表わし，near-breakdown を引き起こすようなブロック構造において，これらの式に現われる係数がどのようになるかを調べた．また，数値的にこれらの評価を確かめた．

ブロック中においては漸化式で求めた多項式の係数は有効精度が悪くなってはいるが，連立一次方程式を直接解いたときとほぼ同等の精度が得られている．しかし，ブロックが終わり本来直接求めたときには精度良く求められるはずの多項式の計算において大きく精度が低下している．徐々に精度が悪くなっていくときには，悪くなっていく段階では漸化式から求めた多項式は方程式を直接解いたときとほぼ同等の精度になっている．

ブロックから抜けるときに引き起こされる桁落ちはかなり大きくなるため，漸化式で求めた結果の精度を保証するためにはブロックを判定するための基準値を厳しいものにする必要がある．ただし，最終的に求める要素がもともと精度が悪い状況のときにはそれに相当した精度の要素からブロックを回避すればよい．

今回は理論的な解析のために連立一次方程式を解いた場合と比較しているが，実際の計算では漸化式の計算の過程において得られる値からブロックを予測する必要がある．この評価をどのように行うか，また，ブロックと判定するための基準値をどのように選ぶかが今後の課題である．

参考文献

[1] G. A. Baker and P. H. Graves-Morris, *Padé Approximants 2nd Edition*, Encyclopedia of Mathematics and its Applications Vol. 59, G. C. Rota ed., Canbridge University Press, New York (1994).

[2] A. Bultheel, *Laurent Series and their Padé Approximations*, Birkhäuser Verlag, Basel (1987).

[3] W. B. Gragg and M. H. Gutknecht, Stable look-ahead versions of the Euclidean and Chebyshev algorithms, *International Series of Numerical Mathematics*, **119**, 231–260 (1994).