

有理関数補間の不必要な極の解析

甲斐博

HIROSHI KAI

愛媛大学工学部情報工学科

DEPARTMENT OF COMPUTER SCIENCE, FACULTY OF ENGINEERING, EHIME UNIVERSITY*

1 はじめに

区間 $x \in [a, b]$ で定義される関数 $f(x)$ の有理関数補間とは、点列を $a = x_1 < x_2 < \dots < x_{m+n+1} = b$ および $f_i = f(x_i)$ のように取り、データ集合 $D = \{(x_i, f_i) | i = 1, \dots, m+n+1\}$ に対し

$$r_{m,n}(x_i) = \frac{p_m(x_i)}{q_n(x_i)} = f_i, \quad i = 1, \dots, m+n+1$$

を満足する有理関数 $r_{m,n}(x)$ を求めることである。ここで、 $p_m(x)$ と $q_n(x)$ は有理関数の分子と分母の多項式であり、それぞれ m 次と n 次の多項式を表す。本論では、そのような有理関数を (m, n) 有理関数と呼び、次数を (m, n) と表す。また、区間 $[a, b]$ のことを近似区間と呼ぶ。

しかし、より高精度の関数近似を得ようとして多くの補間点を取ると、有理関数補間が近似区間内に不必要な極を持つという問題がある [1]。その結果、得られた近似は近似された関数とは定性的に異なり、当然、不必要な極の周辺では近似精度は悪化する。

一方、これまでに多くの計算機実験により、不必要な極の近くには分子の零点が存在することが示されている。すなわち不必要な極は、分子と分母の多項式の近似的な共通因子に起因する [1, 2]。この観察から、近似 GCD を用いて有理関数補間から不必要な極を取り除き、定性的に正しい有理関数近似を得る方法が提案されている。この方法をハイブリッド有理関数近似と言う [1]。

これまでにハイブリッド有理関数近似の有用性は計算機実験によってのみ示されてきた。しかし不必要な極が現れる原因が不明であり、有用性の根拠を示すために不必要な極の解析が重要である。

不必要な極は連立一次方程式の悪条件性により現れることが論文 [3, 4] で示されているが、本研究ではこれに関して再考察を行う。行列が非正則な場合と正則な場合について検討し、有理関数補間に現れる共通因子の記号的表現を示す。これにより不必要な極が現れる原因をより詳細に示すことができる。

2 不必要な極と零点

有理関数補間を次のように表す。

$$r_{m,n}(x) = \frac{p_m(x)}{q_n(x)} = \frac{a_0 + a_1x + \dots + a_mx^m}{b_0 + b_1x + \dots + b_nx^n}$$

*kai@cs.ehime-u.ac.jp

本論では係数 a_0, \dots, a_m および b_0, \dots, b_n が実数の場合を考える。係数を決定するための素朴な方法は、 $b_0 = 1$ と置き、連立一次方程式 $AV = B$ を解くことである。ここで行列 $A \in \mathbb{R}^{(m+n+1) \times (m+n+1)}$ とベクトル $V, B \in \mathbb{R}^{m+n+1}$ は次式で表される。

$$A = \begin{pmatrix} x_1^0 & \cdots & x_1^m & -f_1 x_1^1 & \cdots & -f_1 x_1^m \\ x_2^0 & \cdots & x_2^m & -f_2 x_2^1 & \cdots & -f_2 x_2^m \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{m+n+1}^0 & \cdots & x_{m+n+1}^m & -f_{m+n+1} x_{m+n+1}^1 & \cdots & -f_{m+n+1} x_{m+n+1}^m \end{pmatrix}$$

$$V = (a_0, \dots, a_m, b_1, \dots, b_n)^T$$

$$B = (f_1, f_2, \dots, f_{m+n+1})^T$$

例えば、関数 $f(x) = e^{x+1}$ を近似区間 $x \in [0, 1]$ で (6, 6) 有理関数により近似することを考える。ここで $x_i = (i-1)/12, i = 1, \dots, 13$ とし等間隔の点を取る。Maple 10 上で 9 桁の精度の浮動小数数を使って有理関数補間を計算するためには、例えば次のような 9 行のコードで有理関数補間の分子と分母の多項式 p, q を得ることができる。

```
Digits:=9; f:=exp(x+1); m:=6; n:=6;
X:=Vector(m+n+1, (i)->(i-1)/(m+n));
Y:=Vector(m+n+1, (i)->evalf(subs(x=X[i], f)));
A1:=Matrix(m+n+1, m+1, (i, j)->X[i]^(j-1));
Ar:=Matrix(m+n+1, n, (i, j)->-Y[i]*X[i]^j);
V:=LinearAlgebra:-GaussianElimination(<A1|Ar|Y>);
V:=LinearAlgebra:-BackwardSubstitute(V);
p:=add(V[i]*x^(i-1), i=1..m+1);
q:=1+add(V[i+m+1]*x^i, i=1..n);
```

このとき得られた解は次のような有理関数である。

$$r_{6,6}(x) = p_6(x)/q_6(x) \quad (1)$$

$$p_6(x) = 2.71828183 - 393.374933x + 137.299286x^2$$

$$+ 271.082233x^3 + 119.468451x^4 + 26.8236072x^5$$

$$+ 3.33938023x^6$$

$$q_6(x) = 1.00000000 - 145.714548x + 195.724019x^2$$

$$- 23.3063766x^3 - 6.36988679x^4 + 1.35801789x^5$$

$$- 0.0420127038x^6$$

このときの補間の誤差は

$$\max_{i=1, \dots, 13} \frac{|f(x_i) - r_{6,6}(x_i)|}{|f(x_i)|} = 1.49861451 \times 10^{-7}$$

となる。数值的に問題なく有理関数補間が得られているように見える。しかし、分母の多項式は次の 4 つの実数根を持つ。

$$x = -4.91698877, 0.00692713324, 0.837775598, 25.9046725$$

従って 2 つの不必要な極 $x = 0.00692713324, 0.837775598$ が存在する。

一方、分子の多項式も不必要な極の近くに次の2つの実数根をもつ。

$$x = 0.00692713316, 0.837775596$$

不必要な極と分子の零点はほぼ互いに打ち消しあっており、不必要な極は鋭い特異点となって有理関数補間に現れる。

解は入力 of 微小誤差に対し敏感である。例えば2行目のコードを次のように変更して計算する。

```
X:=Vector(m+n+1,(i)->evalf((i-1)/(m+n)));
```

このとき、次のような全く異なる解を得る。

$$\begin{aligned} r_{6,6}(x) &= p_6(x)/q_6(x) \\ p_6(x) &= 2.71828183 - 3.40766069x - 3.36588559x^2 \\ &\quad + 0.375790819x^3 + 0.529648467x^4 \\ &\quad + 0.116327135x^5 + 0.00821683057x^6 \\ q_6(x) &= 1.00000000 - 2.25360810x + 0.515364437x^2 \\ &\quad + 0.583040241x^3 - 0.311999286x^4 \\ &\quad + 0.0630109370x^5 - 0.00523551402x^6 \end{aligned}$$

補間の誤差は

$$\max_{i=1,\dots,13} \frac{|f(x_i) - r_{6,6}(x_i)|}{|f(x_i)|} = 1.49861451 \times 10^{-7}$$

となり、やはりうまく有理関数補間が得られているように見える。しかし、 $r_{6,6}(x)$ は不必要な極を1つだけ持つ。不必要な零点と不必要な極の位置はそれぞれ0.541012213と0.541012216である。

このように微小な丸め誤差が結果を大きく変えるのは連立一次方程式が悪条件だからである。実際、 A の条件数を求めると、 $\text{cond}(A) = 3.89326330 \times 10^{12}$ となる。条件数に対して浮動小数の桁が9桁しかないので、丸め誤差程度の微小誤差に応じて係数が大きく変化する。その結果、不必要な極および不必要な零点の位置はランダムに移動する。また、浮動小数点数演算の方法や数値計算ライブラリにも依存して結果が変わる。再現性のない病的な現象が有理関数補間に現れる。

3 不必要な極と零点の解析

本節では連立一次方程式が悪条件になると不必要な極が現れる理由を、行列 A が非正則行列の場合と、正則行列だが悪条件の場合に分けて考察する。

3.1 非正則行列の場合

関数 $f(x)$ を既約な有理関数 $f(x) = r_{M,N}(x) = p_M(x)/q_N(x)$ とし、有理関数補間を求めることを考える。実用では有理関数の有理関数補間 $r_{m,n}(x)$ を求めることに意味はないが、ここでは有理関数に現れるGCDの理由を調べるために行う。

有理関数補間の次数は $M < m, N < n$ を仮定する。つまり行列 A が非正則行列になるのは、このように次数の小さな有理関数を次数の大きな有理関数で補間する場合である。この時、有理関数補間 $r_{m,n}(x)$ に関して次の2つの性質を示すことができる。

補題 1

有理関数補間は次数の小さな有理関数と等しくならなければならない。すなわち

$$r_{m,n}(x) = r_{M,N}(x)$$

証明 $r_{m,n}(x) \neq r_{M,N}(x)$ と仮定する。この時、 $r_{m,n}(x)$ と $r_{M,N}(x)$ の交点は多くても $\max\{m+N, n+M\}$ 個しかない。しかし $r_{m,n}(x)$ と $r_{M,N}(x)$ は $m+n+1$ 個の交点を持つ。よって $r_{m,n}(x) = r_{M,N}(x)$ でなければならない。 ■

また、有理関数補間 $r_{m,n}(x)$ を求める場合、係数の数が $r_{M,N}(x)$ の係数の数よりも多いため行列 A がランク落ちする。どのくらいランク落ちするかは次のように考えられる。

補題 2

$\gamma = \min(M-m, N-n)$ とすると、 A のランクは $m+n+1-\gamma$ となる。

証明 γ 次の多項式 $g(x)$ を考える。但し $g(x)$ の定数項は 1 とする。ここで $p_m(x) = g(x)p_M(x)$ および $q_n(x) = g(x)q_N(x)$ としても上で述べた補題を満足する。有理関数 $r_{m,n}(x)$ を求めるとき変数は $m+n+1$ あるが、従って独立な変数はこれより γ 少ない。有理関数 $r_{M,N}(x)$ は既約であると仮定しているの、一次独立な方程式の数は $m+n+1-\gamma$ である。 ■

以上の性質から次数の低い有理関数の有理関数補間を連立一次方程式では求められないことが分かる。しかし、記号を導入することにより次のように計算を進めることができる。

$AV = B$ を Gauss の消去法で三角化した方程式を $\hat{A}V = \hat{B}$ とする。この時、解は次のように表せる。

$$V_i = \frac{1}{\hat{A}_{i,i}} \left(\hat{B}_i - \hat{A}_{i,i+1}V_{i+1} - \cdots - \hat{A}_{i,m+n+1}V_{m+n+1} \right)$$

ここで γ ランク落ちして決定できない変数に対し t_1, \dots, t_γ なる記号を導入し、 $V_{m+n+1} = b_n = t_\gamma, V_{m+n} = b_{n-1} = t_{\gamma-1}, \dots, V_{m+n-\gamma+2} = b_{n-\gamma+1} = t_1$ と置く。この時、次のように有理関数補間を表現できる。

$$r_{m,n}(x) = \frac{p_0(x) + t_1 p_1(x) + \cdots + t_\gamma p_\gamma(x)}{q_0(x) + t_1 q_1(x) + \cdots + t_\gamma q_\gamma(x)}$$

この結果に対し上で述べた性質を考慮すると次の定理を導くことができる。

定理 3

有理関数補間は、 $\text{GCD}g_\gamma(x)$ を使って、次のように表すことができる。

$$\begin{aligned} r_{m,n}(x) &= \frac{g_\gamma(x)p_M(x)}{g_\gamma(x)q_N(x)} \\ g_\gamma(x) &= \begin{cases} 1 & (\gamma = 0) \\ 1 + t_1 v_1(x) + \cdots + t_\gamma v_\gamma(x) & (\gamma > 0) \end{cases} \end{aligned} \quad (2)$$

GCD を構成する $v_i(x)$ は次の多項式で表される。

$$v_i(x) = c_i x + \cdots + c_n x^i \quad (3)$$

また $v_i(x)$ の係数は次の漸化式で与えられる。

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{1}{b_N} \\ c_i &= -\frac{b_{N-i+1}c_1 + b_{N-i}c_2 + \cdots + b_{N-1}c_{i-1}}{b_N} \quad (i > 1) \end{aligned} \quad (4)$$

ここで b_i は有理関数 $r_{M,N}(x)$ の分母の多項式の係数である。但し $i < 0$ の場合 $b_i = 0$ とする。

証明 記号 t_i を含まない有理関数 $p_0(x)/q_0(x)$ に関して、 $r_{M,N}(x) = p_0(x)/q_0(x)$ が成り立たなければならない。さらに記号 $t_i, i = 1, \dots, \gamma$ に関係する項についてそれぞれ $p_i(x) = v_i(x)p_0(x)$ かつ $q_i(x) = v_i(x)q_0(x)$ を満足する必要がある。よって (2) 式が成り立つ。

有理関数補間が連立一次方程式の解となるためには、分母の多項式について、

$$g_\gamma(x)q_M(x) = 1 + \dots + t_1x^{n-\gamma+1} + t_2x^{n-\gamma+2} + \dots + t_\gamma x^n \quad (5)$$

のように高次項の係数が記号 t_1, \dots, t_γ で表されなければならない。(3) 式および (4) 式を仮定した場合、(5) 式が成り立つことを証明する。ここでは帰納法を用いる。

$\gamma = 1$ の場合、 $v_1(x) = c_1x = x/b_N$ であり、 $g_1(x) = 1 + t_1x/b_N$ となる。従って

$$g_1(x)q_N(x) = (1 + t_1x/b_N)(1 + \dots + b_Nx^N) = 1 + \dots + t_1x^{N+1}$$

となり (5) 式を満足する。 $\gamma = k-1$ の場合 (5) 式が成り立つことを仮定すると、 $\gamma = k$ のとき次のようになる。

$$\begin{aligned} g_k(x)q_N(x) &= (g_{k-1}(x) + t_kv_k(x))q_N(x) \\ &= g_{k-1}(x)q_N(x) + t_kv_k(x)q_N(x) \end{aligned}$$

ここで、上の式の右辺の第一項 $g_{k-1}(x)q_N(x)$ は仮定より $\gamma = k-1$ について (5) 式を満足する。右辺全体が (5) 式を満足するためには、右辺の第二項 $t_kv_k(x)q_N(x)$ の主係数が t_k となり、その下の次数の $k-1$ 個の項の係数が零になればよい。

$$\begin{aligned} t_kv_k(x)q_N(x) &= t_k(c_kx + \dots + c_1x^k)(1 + \dots + b_Nx^N) \\ &= t_k((c_1b_N)x^{N+k} + (c_1b_{N-1} + c_2b_N)x^{N+k-1} + \dots) \end{aligned}$$

この式の係数が上で述べたような条件を満足するためには、

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{1}{b_N} \\ c_i &= -\frac{b_{N-i+1}c_1 + b_{N-i}c_2 + \dots + b_{N-1}c_{i-1}}{b_N} \quad (2 \leq i \leq k) \end{aligned}$$

となることである。これは (3) 式および (4) 式である。従って $\gamma = k$ の場合も (5) 式を満足する。従って GCD の係数は (3) 式および (4) 式により表される。 ■

3.2 正則行列の場合

前節では行列が非正則行列なら GCD を持つことを示した。正則行列の場合は unattainable point が存在するときを除いて理論上 GCD を持たない。しかし第 2 節で示したように、行列が悪条件ならば近似的な GCD を持つ。

非正則行列と (悪条件な) 正則行列 A の関係については次の定理が知られている [5]。

定理 4

P を特異行列の集合とする。その時、正則行列 A から P までの距離は次のように表される。

$$\text{dist}(A, P) = \inf_{S \in P} \|A - S\| = \frac{\|A\|}{\text{cond}(A)}$$

ここで $\|\cdot\|$ は行列のノルムを表す。

つまり、浮動小数の桁数が $\left\lceil -\log_{10} \frac{\|A\|}{\text{cond}(A)} \right\rceil$ 以下では、ある非正則行列と正則行列の数値表現が同じになる可能性があり、 A が正則行列であっても数値的には非正則行列と区別がつかなくなる。その結果、非正則行列と同じ理由により係数に GCD を持つと考えられる。

例えば関数 $f(x) = e^{x+1}$ の有理関数補間 (1) 式を考える。分子と分母の $\epsilon = 10^{-7}$ の近似 GCD を Maple 10 の近似 GCD (QRGCD) を使って求めると、

$$g(x) = 0.763925134x^2 - 0.645289647x + 0.00443335026$$

という結果を得る。これを取り除いた有理関数近似は、

$$\begin{aligned} r_{4,4}(x) &= \frac{p_4(x)}{q_4(x)} & (6) \\ p_4(x) &= 0.0193797031x^4 + 0.172037759x^3 \\ &\quad + 0.838529498x^2 + 2.28050383x + 2.71828187 \\ q_4(x) &= -0.000243815819x^4 + 0.00767514632x^3 \\ &\quad - 0.0304822619x^2 - 0.161048826x + 1.00000000 \end{aligned}$$

となる。 $f(x) = r_{4,4}(x)$ を近似したと仮定し、前節の結果を適用してみる。

この場合、 $M = 4$, $N = 4$ なので、 $\gamma = 2$ と仮定する。(1) 式より $t_1 = 1.35801789$, $t_2 = -0.0420127038$ である。また $b_4 = -0.000243815819$, $b_3 = 0.00767514632$ である。漸化式より $\gamma = 2$ のとき、GCD は

$$g(x) = 1 + \left(\frac{t_1 b_N - t_2 b_{N-1}}{b_N^2} \right) x + \left(\frac{t_2}{b_N} \right) x^2$$

と表される。よって、

$$\begin{aligned} g(x) &= 1 - 145.553500x + 172.313281x^2 \\ &= 172.313281(x - 0.00692713324)(x - 0.837775598) \end{aligned}$$

この結果は不必要な極の位置と一致する。このように悪条件の場合に有理関数近似が GCD を持つ理由は、数値計算の精度が不十分であり非正則行列のような振る舞いをするためであることが分かる。

一般に記号的な GCD は (2) 式より次のように書くことができる。

$$\begin{aligned} g_1(x) &= 1 + \frac{1}{b_N} (t_1 x) \\ g_2(x) &= 1 + \frac{1}{b_N} \left(\frac{t_1 b_N - t_2 b_{N-1}}{b_N} x + t_2 x^2 \right) \\ g_3(x) &= 1 + \frac{1}{b_N} \left(\frac{t_1 b_N^2 - t_2 b_{N-1} b_N + t_3 b_{N-1}^2 - t_3 b_{N-2} b_N}{b_N^2} x + \frac{t_2 b_N - t_3 b_{N-1}}{b_N} x^2 + t_3 x^3 \right) \\ &\vdots \end{aligned}$$

定数項を除く全ての係数について $1/b_N$ がかかっているが、一般に近似する関数が滑らかであれば、例えば (6) 式に見られるように有理関数の高次になるに従って係数の値は小さくなる。数値計算では記号 t_i には浮動小数の誤差がランダムに含まれるため GCD の振る舞いは複雑であるが、もし $t_i = O(1)$ であるような数値結果についてのみ考えると、GCD の定数項は b_N がかかるため 1 次以上の項の係数に比べてかなり小さくなる。従って区間 $[-1, 1]$ の範囲に零点を持つようになり、これが不必要な極を生じる原因であると考えられる。

4 まとめ

本論では有理関数補間の不必要な極がどのような理由で現れるかについて検討した。不必要な極は有理関数補間に含まれる近似的な GCD が原因となっており、それは行列の悪条件性によって現れる。また GCD を記号的に表現することにより不必要な極が現れる原因を示すことができた。

有理関数補間で不必要な極が現れるのを防ぐためには、多倍長演算を用いて十分な精度で近似を求めるか、ハイブリッド有理関数近似のような方法で次数の低い有理関数近似を得るかである。また連立一次方程式以外の方法で有理関数補間を求める場合、不必要な極が現れるかどうかを検討することは今後の課題である。

参 考 文 献

- [1] 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
- [2] H.Kai and M.T.Noda, Hybrid rational function approximation and its accuracy analysis, *Reliable Computing* 6, pp.429–438, 2000
- [3] Y.Murakami, H.Kai and M.T.Noda, Approximate Algebraic Computation for Rational Function Approximations, ACA'2002
- [4] 村上 裕美, 甲斐 博, 野田 松太郎, ハイブリッド有理関数近似と悪条件問題, 数式処理, Vol.11, No.3,4, pp.141–152, 2005
- [5] J.W.Demmel, On Condition Numbers and the Distance to the Nearest Ill-posed Problem, *Numer. Math.*, 51, pp.251–289, 1987