近似的ＧＣＤを用いた有理関数近似[†]

1X−3

甲斐博　　野田松太郎
愛媛大学工学部 情報工学科

1 はじめに

我々はすでに近似的GCD[6]を用いた有理関数近似の技法を提案し[3], その有用性について議論している. 有理関数近似は, 多項式近似に次いで簡単な近似法であり, かつ特異点をもつ関数の近似にも適用できる. このような利点を持つにもかかわらず, 有理関数近似の幅広い利用の障壁となっていた問題点は, 近似有理関数の既約性にあった. 有用な定理の多くは既約な有理関数を対象としているが[4, 5], 係数は一般に浮動小数で有理関数の既約性に関してはほとんど何もいえない. 我々の考え方は, 分子･分母の浮動小数係数多項式の近似的共通因子を求め, これによって有理関数を近似的に既約なものにする点にあった. この新しい手法の応用は広い範囲の問題に有効であろうが, いまだ理論的な考察はほとんどなされていない. このための出発点の一つとして, 本論ではノイズを含んだデータの平滑化を取りあげる. 近似的GCDを用いた有理関数近似はノイズの平滑化に有効であることを[3]で示したが, この点を再考する. 簡単なモデルの平滑化の過程を調べ, ノイズと有理関数近似の特異点の位置との間の関係を本論で明らかにする.

2 近似的GCDを使った有理関数近似

関数 $f(x)$ の範囲 $[a, b]$ での有理関数近似は次のようにして求める. 有限個の離散点列 $x_0 = a, x_1, \cdots, x_N = b$ を与え, 対応する関数値 $f_i = f(x_i)$, $i = 0, \cdots, N$を計算する. 結局, (x_i, f_i) の有限個の組を与えるので, 関数値を実験データなどに置き換えても支障はない. これらの組を正確に通る有理関数

$$r_{m,n} = \frac{p_m}{q_n}$$

を決定する. ここで p_m, q_nは各々次数 m, n の多項式であり, $p_m = \sum_{j=0}^{m} a_j x^j, q_n = \sum_{j=0}^{n} b_j x^j$である. この有理関数を (m, n) 有理関数と呼び, 以下便利のために $b_0 = 1$ とおく. 多項式の係数 a_j, b_jは一般に浮動小数であり, ガウス消去法により簡単に求め得る. しかし結果の有理関数は近似区間内での連続性については何も保証されず, むしろ一般に分母の零点の存在により特異になる. 係数が整数なら, 分子, 分母の共通因子を求めて, 特異性は除き得るもの (有理関数を既約にし得る) か否かを知ることができる. しかし, 今の場合は係数が浮動小数になるので, 従来からの技法のみではこのような処理は不可能で, 有理関数近似はあまり実用的な手法とはなりにくかった.

浮動小数係数を持つ2つの多項式間の共通因子を求めるための近似的GCD算法が発表されている[6]. そこで, 得られた有理関数の既約性を調べるために, 共通因子に代えて近似的GCD算法で求まる近似的共通因子を用いることを試みる. この方法は以下のようにまとめられる.

アルゴリズム　近似的GCDを用いた有理関数近似

入力 ：有限個の点, $x_0, x_1, \cdots, x_N$ と対応する
$f_i = f(x_i), i = 0, \cdots, N$,
近似的GCDのための cutoff 値 $\epsilon (0 < \epsilon \ll 1)$

出力 ： $(x_0, f_0), (x_1, f_1), \cdots, (x_N, f_N)$ を近似する有理関数
$r(x) = p(x)/q(x)$

方法 ：

1. 入力データを近似する次数 (m, n) の有理関数
$$r^O_{m,n}(x) = \frac{p^O(x)}{q^O(x)} = \frac{\sum_{j=0}^{m} a_j x^j}{\sum_{j=0}^{n} b_j x^j}, \quad b_0 = 1$$
を求める. ただし, $N = m + n + 1$
2. $p^O(x)$ と $q^O(x)$ の精度ϵの近似的GCDを求める.
$$g = \mathrm{ApxGCD}(p^O(x), q^O(x); \epsilon)$$
3. 近似的に既約な有理関数
$$r^A(x) = \frac{p^A(x)}{q^A(x)} = \frac{\frac{p^O(x)}{g(x)}}{\frac{q^O(x)}{g(x)}}$$
を求める. ただし, 多項式の除算は近似除算を行う.
4. 以下の有理関数の正規化を行う.
   (a) $q^A(x)$ の定数項を1にする ($r^A(x)$ を $q^A(x)$ の定数項で割る).
   (b) $r^A(x)$ の微小係数項を無視する.
5. 正規化した有理関数を $r(x) = p(x)/q(x)$ とする.

このような手法で求めた有理関数近似の有用性はハイブリッド積分への応用も含めて[3, 1]に詳しく述べた.

[†] Rational Function Approximation by Using Approximate GCD Algorithm, Hiroshi Kai, Matu-Tarow Noda, Department of Computer Science, Ehime University

3 有理関数近似によるノイズの平滑化

近似的 GCD 算法の特色は代数方程式の悪条件性を取り除き, 良条件のものに変換することにある. これは, 関数の急激な変化を吸収し, ある意味でのデータの平滑化をもたらすことを期待させる. 以下, この点を簡単なモデルを通じて検討する. モデルは本来の直線,f(x) = x に対応する 5 個のデータの組とそれに色々の大きさのノイズを人工的に加えたものとする. それらは

x	exact	small noise	large noise
	P.1	P.2 $\sim$ 4	P.5
0.00	0.00	0.00	0.00
0.25	0.25	$0.25-\delta$	0.25
0.50	0.50	$0.50+\delta$	1.50
0.75	0.75	$0.75-\delta$	0.75
1.00	1.00	1.00	1.00

である. ただし,$\delta = 10^{-7}, 10^{-5}, 10^{-3}$ の 3 通りを取る. これらを各々,P.2,P.3,P.4 とする. ノイズを含んだデータを近似し,$f(x)$ に近い関数が決まればノイズは平滑化されたことになる. まず, 通常の有理関数近似 $r_{2,2}$ を求める. この時の関数形を次に示す.

$$\text{P.1} \quad f(x) = \frac{0.0 + 1.0x + 0.0x^2}{1 + 0.0x + 0.0x^2} = x$$

$$\text{P.2} \quad f(x) = \frac{0.10124 \times 10^{-15} + 0.99999x - 1.99999x^2}{1.0 - 2.00000x + 0.10666 \times 10^{-5}x^2}$$

$$\text{P.3} \quad f(x) = \frac{0.15368 \times 10^{-16} + 0.99994x - 1.99990x^2}{1.0 - 2.00006x + 0.00010x^2}$$

$$\text{P.4} \quad f(x) = \frac{-0.10408 \times 10^{-15} + 0.99467x - 1.99011x^2}{1.0 - 2.00608x + 0.01064x^2}$$

$$\text{P.5} \quad f(x) = \frac{0.0 + 1.0x - 2.0x^2}{1.0 - 2.0x + 0.0}$$

明らかに, 本来の直線を再現する P.1 は当然として, すべての有理関数は正確にノイズを含んだ入力データの点を通過する (attainable である). しかしノイズを除去した $f(x)$ を再現することはできない. ところが,P.5 のように大きなノイズ (実験時のミス) が含まれても忠実にその点を通る有理関数近似になる. ノイズを除去するために, アルゴリズムに従って, 分子, 分母の近似的 GCD を $\epsilon = 10^{-3}$ で求めると, 次のようになる.

P.2 $g = 0.18750 \times 10^7 x - 937500.0$

P.3 $g = 18750.5x - 9375.2$

P.4 $g = 188.00x - 93.964$

P.5 $g = 1.0x - 0.5$

$r_{2,2}/g$ で求めた既約な有理関数は P.2,3,4,5 に対し

$$\text{P.2} \quad r(x) = \frac{0.99999x}{1.0 - 0.53333 \times 10^{-6}x}$$

$$\text{P.3} \quad r(x) = \frac{0.99995}{1.0 - 0.00005x}$$

$$\text{P.4} \quad r(x) = \frac{0.88450 \times 10^{-6} + 0.99468x}{1.0 - 0.005319x}$$

$$\text{P.5} \quad r(x) = 1.0x$$

となる. 得られた有理関数は必ずしも全てのノイズを含んだ点を正確に通ることはない (unattainable である). しかし, ノイズを除去した $f(x)$ の関数形に近くなる. 特に P.5 のような大きなノイズをうまく取り除くことが可能である. ここで, 平滑化がどのようにして行われるかを考察する.P.5 の近似的 GCD,g を見ると, $x = 0.5$ で $g = 0$ となることがわかる. すなわち, ここで挿入した大きなノイズの位置は有理関数近似の特異点に対応する.P.2 $\sim$ 4 は 3 個の小さなノイズを挿入しているが, そのうちの 1 個 ($x \simeq 0.5$) が特異点に対応する. したがって, 近似すべきデータに含まれるノイズは有理関数近似の特異点を生じ, これが近似的 GCD によって取り除かれることがわかる.

4 むすび

本論ではハイブリッド計算の視点から関数近似の技法を見直し, 新しい有理関数近似について述べた. 特に, ノイズの入ったデータについて考察し, 近似有理関数の特異性はノイズに強く依存していること, 近似的 GCD 算法により得られる近似共通因子はノイズの点に対応していることを数値的に見た. この数値結果を今後, より理論的に考察する必要がある. また, 近似的 GCD 算法での cutoff パラメタϵとノイズの大きさとの関係, 最良近似とここで得た有理関数近似との関係, ノイズを含んだデータと各種関数近似の手法や統計料との関係なども解明しなければならない.

参考文献

[1] 宮広栄一, 野田松太郎, ハイブリッド積分アルゴリズムとその応用について, 数理解析研講究録 数式処理とその数学研究への応用, 1992.

[2] M.T. Noda, and E. Miyahiro, A Hybrid Approach for the Integration of a Rational Function, Jour. CAM,March,1992

[3] 野田松太郎, 宮広栄一, 甲斐博, 近似的 GCD を用いた有理関数近似, 数理解析研講究録 787, 非線形問題の数値解析, pp.150-162, 1992.

[4] J.R. Rice, *The Approximation of Functions* II, Addison-Wesley Pub. Co. (1969), pp.76–122.

[5] T.J. Rivlin, *An Introduction to the Approximation of Functions*, Blaisdell Pub. Co. (1969), pp.120–141.

[6] T. Sasaki and M.T. Noda, Apporoximate Square-free Decomposition and Root-finding Ill-conditioned Algebraic Equations, J. Inf. Proc, 12(1989), 159-168.