

平方根を近似する高次収束法

小沢 一文

仙台電波高専情報工学科

本論文では、平方根を近似する高次収束法のアルゴリズム群を提案し、それらの多倍長浮動小数点演算における計算効率について考察している。ここで提案されたアルゴリズム群は、収束の次数を任意に高くとれ初期値に無関係に収束するという特徴がある。このアルゴリズム群の反復関数はどれも有理関数になっていて、収束の次数を2とすればニュートン法になり、3とすればBailey法となる。この有理関数を多倍長演算で効率的に計算する方法を提案し、時間計算量の解析を行っている。その結果、乗算に対する除算の時間が比較的小さいとき、5次収束法を二次因子に分解する方法が最も高速であり、逆に、除算にかなり時間を要するときは除算を含まない「逆平方根法」が最も高速であることが判明した。この結果は乗算および除算の方法に関係なく言えるものである。

A Family of Higher-Order Converging Algorithms for Approximating to Square Roots

Kazufumi Ozawa

Department of Information Technology, Sendai National College of Technology,
Kami-Ayashi, Aoba-Ku, Sendai 989-31, JAPAN.

e-mail:ozawa@sendai-ct.ac.jp

We derive a family of higher-order converging algorithms for approximating to square roots. This family includes the Newton and the Bailey iterations, and is globally convergent. The iteration functions of these algorithms are rational functions. In order to reduce the time-complexities in multiple-length arithmetic, we propose the various methods for the computations of the rational functions. Time-complexity analysis shows that the 5-th order algorithm by "square factor decomposition" is the fastest if the time ratio of division to multiplication is relatively small, and that the "reverse square root method" is the fastest if this ratio is considerably large. This result is independent of the methods of the multiplications.

1. まえがき

本論文では平方根に収束する高次収束法の解法群を導出し、その多倍長浮動小数点演算における計算法を工夫することによって、最も高速なアルゴリズムをその解法群の中から見出す。平方根の高精度計算のアルゴリズムに関しては、これまでに Dutka J¹⁾ が連分数展開を用いた 2 次収束法を提案し、それを用いて $\sqrt{2}$ を 100 万桁計算した。また、金田²⁾ はそれを用いていきなり 1600 万桁計算したという実績がある。これに対して、小沢、海野³⁾ は Dutka J のアルゴリズムを高次のものへと拡張してきた。しかし、これらのアルゴリズムはどれも整数の平方根のみに適用可能であった。これに対して、本論文で提案するものは、任意の実数に適用可能であり、収束の回数も任意に高くとれるという特徴がある。

2. 一次収束法の導出

はじめに、 $a > 0$ の平方根に収束する一次収束列を導出する。まず次の差分方程式を考える：

$$(2.1) \quad \begin{aligned} U_m &= 2uU_{m-1} - (u^2 - av^2)U_{m-2}, \\ V_m &= 2uV_{m-1} - (u^2 - av^2)V_{m-2}, \quad m=2,3,\dots \end{aligned}$$

方程式(2.1)の一般解は、

$$(2.2) \quad \begin{aligned} U_m &= c_{11}\lambda_1^m + c_{12}\lambda_2^m, \\ V_m &= c_{21}\lambda_1^m + c_{22}\lambda_2^m, \quad m=0,1,\dots \\ \lambda_1 &= u + \sqrt{av}, \quad \lambda_2 = u - \sqrt{av} \end{aligned}$$

である。ここで、

$$(2.3) \quad uv > 0$$

を仮定すれば、特性根の間に、

$$(2.4) \quad |\lambda_1| > |\lambda_2|$$

という関係が成立する。このとき、式(2.2)に現れる係数が、例えば

$$(2.5) \quad c_{11} = c_{12} = 1/2, \quad c_{21} = -c_{22} = 1/(2\sqrt{av})$$

を満たせば、数列 $\{U_m / V_m\}$ は u, v に無関係に \sqrt{av} に収束することが直ちに示される。条件(2.5)と矛盾しない U, V の初期値は、

$$(2.6) \quad U_0 = 1, U_1 = u, \quad V_0 = 0, V_1 = v$$

である。以下、条件(2.4)が成り立ち、初期値を上式のように定めた場合のみを考察する。 W_m の持つ誤差 e_m は、式(2.2), (2.5) より

$$(2.7) \quad e_m = W_m - \sqrt{av} = 2\mu^m \sqrt{av} / (1 - \mu^m), \quad m=1,2,\dots,$$

として評価される。ここで、 $\mu = \lambda_2 / \lambda_1$ と置いた。この式より、

$$(2.8) \quad \lim_{m \rightarrow \infty} e_m / e_{m-1} = \mu$$

となり、 W_m は \sqrt{av} に漸近的に一次収束することが示される。ここで、式(2.1)において非平方な整数 a に対して、 u, v を $u^2 - av^2 = \pm 1$ と選べば、式(2.1)はそれぞれ a の連分数近似の中間近似分数における分母と分子を与えていることを付記しておく⁴⁾。

3. 高次収束法の導出

本章では、一次収束列(2.1)を加速し \sqrt{av} に高次収束するような数列を生成するアルゴリズムを導出する。式(2.2)に式(2.5)を代入すると、 U_m, V_m は

$$(3.1) \quad U_m = \sum_{i=1}^m \binom{m}{2i} a^i u^{m-2i} v^{2i} \equiv A_m(u, v),$$

$$(3.2) \quad V_m = \sum_1^m \binom{m}{2i+1} a^i u^{m-2i-1} v^{2i+1} \equiv B_m(u, v)$$

となる。ここで二項係数は、

$$\binom{i}{j} = 0, \quad i < j, \quad \text{または} \quad j < 0$$

と約束し、 Σ は二項係数が0にならない範囲でとるものとする。これより、 $W_m = U_m / V_m$, $m=1, 2, \dots$ を $W_1 = u/v$ によって表すと、

$$(3.3) \quad W_m = G_m(W_1) = A_m(W_1) / B_m(W_1)$$

となる。ここで、

$$(3.4) \quad A_m(x) = A_m(x, 1), \quad B_m(x) = B_m(x, 1)$$

である。有理関数Gは任意の $r > 1$ について、

$$(3.5) \quad G_r(\sqrt{a}) = \sqrt{a},$$

$$(3.6) \quad G_r^{(j)}(\sqrt{a}) = 0, \quad j=1, 2, \dots, r-1,$$

$$(3.7) \quad G_r^{(r)}(\sqrt{a}) \neq 0$$

を満たしていること、すなわち、有理関数 G_r によって反復法

$$(3.8) \quad x_{k+1} = G_r(x_k), \quad x_0 > 0, \quad k=0, 1, \dots,$$

を定義すると、数列 $\{x_k\}$ は \sqrt{a} に漸近的に r 次収束することが示される。また、この r 次収束列と式(2.1)で定義される一次収束列との関係は、

$$(3.9) \quad x_k = W_{r^k} = U_{r^k} / V_{r^k}, \quad k=0, 1, 2, \dots,$$

である。以上の結果より、反復法(3.8)は $x_0 > 0$ を満たす任意の初期値から出発しても \sqrt{a} に収束し、漸近的に r 次収束することが示される。

ここで、 r 次収束法の例をいくつか示す：

- (1) $r=2$, $x_{k+1} = (x_k^2 + a) / (2x_k)$; ニュートン法,
- (2) $r=3$, $x_{k+1} = (x_k^3 + 3ax_k) / (3x_k^2 + a)$; Bailey法,
- (3) $r=4$, $x_{k+1} = (x_k^4 + 6ax_k^2 + a^2) / (4x_k^3 + 4ax_k)$.

4. 高次収束法とその計算効率

本章では、 r 次収束法(3.8)の計算法を工夫しその時間計算量を求め、何次の解法が最も高速かを考察する。ここでは、式(3.8)の r 次収束法の他に $1/\sqrt{a}$ に収束する 2 次収束法

$$(4.1) \quad x_{k+1} = x_k - x_k(1 - ax_k^2) / 2$$

を用いて \sqrt{a} の近似を求める解法についても考察する(この解法をここでは「逆平方根法」と名づける)。以下の考察では、初期値 x_0 として \sqrt{a} の t 桁近似を用い、 r 次収束法を p 回反復し \sqrt{a} の s ($s = r^p t$) 桁近似を求めるのに要する時間計算量(time complexity) $T_r(t; s)$ を求める。演算は多倍長浮動小数点演算とし、演算の方式は常に一定の桁で演算する「固定長演算」と必要に応じて桁数の増減可能な「可変長演算」の2つとする。

4.1 固定長演算

ここで演算の桁数を N とし、 N 桁の浮動小数点数の乗算一回当たりの時間計算量を $M(N)$ と表し、 r 次収束法の反復一回当たりの実質的な乗算の回数を c_r で表すと、 $T_r(t; s)$ は

$$(4.2) \quad T_r(t; s) = p c_r M(N) = \log(s/t) (c_r / \log r) M(N)$$

となる。この式より、上式の r に依存する部分すなわち $c_r / \log r$ が全時間を決定することになる。以下、多項式 A_r , B_r の計算法をいくつか提案し、提案された方法の実質的な乗算の回数 c_r を求め、

それらの時間計算量を比較検討する。

(1) Horner の方法

例えば、 $r=2m$ のとき、 $X=x^2$ と置いて、

$$(4.3) \quad A_r(x) = (\dots((X+a_1)X+a_2)\dots+a_{m-1})X+a_m,$$

$$(4.4) \quad B_r(x) = x\{(\dots(rX+b_1)X+b_2)\dots+b_{m-2}\}X+b_{m-1}$$

となる。ここで、 r を単長数と仮定すれば多倍長数の乗算は $2m=r-2$ 回となる。同様な考察を行うことによって $r=2m+1$ のときも $r-2$ 回の乗算が必要になることがわかる。その他、 $X=x^2$ で二乗演算 1 回、 $G=A/B$ で除算 1 回を要する —— 二乗演算は多倍長数を表す桁の間の対称性を考慮すると乗算の半分の時間で計算できるのでここでは特別扱いする。したがって、 c_r は

$$(4.5) \quad c_r = r - 2 + 0.5 + d$$

となる。ここで、 d は除算の乗算に対する時間比とする。

(2) 二次因子分解法

二次式 $X^2 + aX + \beta$ を、 $X^2 + aX + \beta = (X + a/2)^2 - a^2/4 + \beta$ と変形し、 $(X + a/2)^2$ を二乗演算を用いて計算すると、定数 $a/2$ と $a^2/4$ の計算に要する時間を無視できるような状況においては、この二次式は Horner の方法で計算するときの半分の時間で計算できることになる。この定数の計算のための時間が無視できるような状況とは、多くの X について同じ二次式を何回も計算するときがこれにあたる。

ここでは多項式 A_r, B_r を二次因子に分解し、各二次因子をいま述べた方法で計算し、計算量を減らす方法を提案し —— これをここでは「二次因子分解法」と呼ぶことにする ——、その時間計算量の解析を行う。例えば、 $r=4m+2$ のとき多項式 A_r, B_r を二次因子に分解すると、

$$(4.6) \quad A_r(x) = X \prod_{i=1}^m (X^2 + \alpha_i X + \beta_i) + a_{2m-1},$$

$$(4.7) \quad B_r(x) = r x \prod_{i=1}^m (X^2 + \gamma_i X + \delta_i),$$

であるから、反復一回当たり、 $X=x^2$ の計算を含めて二乗演算 $2m+1$ 回、乗算 $2m-1$ 回、除算 1 回を要することがわかる。一般の r について解析すると、

$$(4.8) \quad \begin{aligned} r \equiv 0, 2 \pmod{4} & : c_r = 3r/4 - 1 + d, \\ r \equiv 1 \pmod{4} & : c_r = 3r/4 - 5/4 + d, \\ r \equiv 3 \pmod{4} & : c_r = 3r/4 - 3/4 + d \end{aligned}$$

となる。

(3) Todd の 4 次式 ⁵⁾

任意の 4 次式 $X^4 + aX^3 + bX^2 + cX + d$ は、

$$X^4 + aX^3 + bX^2 + cX + d = \{(X - \alpha)^2 + \beta\} \{(X - \alpha)^2 + X + \gamma\} + \delta$$

のように変形できる⁵⁾。 $r=8m+1$ のとき、 $A_r(x)$ は $x \times (X$ の $4m$ 次式)、 $B_r(x)$ は X の $4m$ 次式となる。ただし $X=x^2$ である。 A_r, B_r に含まれる $4m$ 次式を 4 次式の積に分解し、各 4 次式を二乗演算を用いて計算すると、 $r=8m+1$ のとき、

$$(4.9) \quad c_r = 5r/8 - 9/8 + d$$

となる。

(4) Knuth の方法 ⁶⁾

因数分解などの前処理を許すとき、多項式の計算の効率的な計算方法として Knuth の方法というのがよく知られている。Knuth の方法を $r=7$ の場合について説明する。 $r=7$ とすると、

$$(4.9) \quad A_7(x) = x(X^3 + 21a X^2 + 35a^2 X + 7a^3) = x \{ (Y + 35a^2)(X + 21a) - 728a^3 \},$$

$$(4.10) \quad B_7(x) = 7X^3 + 35a X^2 + 21a^2 X + a^3 = (7Y + 21a^2)(X + 5a) - 104a^3,$$

$$X = x^2, \quad Y = X^2$$

となり、乗算3回、二乗演算2回、除算1回で反復一回が終了する。この方法では、先ほどのHornerの方法と比べ、二乗演算は1回多くなるが乗算が2回減るため、全体としては計算量が減少する。一般の場合について解析した結果は、

$$(4.11) \quad \begin{aligned} r \equiv 0, 2 \pmod{4} & : c_r = r/2 + 1 + d, \\ r \equiv 1 \pmod{4} & : c_r = r/2 + 1.5 + d, \\ r \equiv 3 \pmod{4} & : c_r = r/2 + 0.5 + d \end{aligned}$$

である。

(5) Paterson-Stockmeyerの方法⁵⁾

この方法は、多項式の計算において定数倍の演算の時間計算量が無視できるとき、 m 次の多項式の計算が $O(\sqrt{m})$ の時間計算量でできるアルゴリズムである。例えば、 $r=21$ の場合 $Y=X^4$ と置けば、

$$(4.12) \quad A_{21}(x) = x \{ (X^2 + a_1 X + a_2) Y^2 + (a_3 X^3 + a_4 X^2 + a_5 X + a_6) Y + (a_7 X^3 + a_8 X^2 + a_9 X + a_{10}) \},$$

$$(4.13) \quad B_{21}(x) = (21 X^2 + b_1 X + b_2) Y^2 + (b_3 X^3 + b_4 X^2 + b_5 X + b_6) Y + (b_7 X^3 + b_8 X^2 + b_9 X + b_{10})$$

である。ここでもし a が単長数であると仮定すると、上に示した各係数 a, b も単長数となり、()の中で係数 $\times X$ のベキ(X の各ベキは $Y=X^4$ を計算する過程ですでに求まっている)という演算に要する時間は無視できる。上の2つの多項式を Y に関する多項式とみなしてHornerの方法で計算すると、乗算7回、二乗演算2回、除算1回でワンステップ終了する。これは前に示したHornerの方法に比べて大変な計算量の節約になる。一般の r について解析すると次のようになる：

$$r \equiv 0 \pmod{2} : c_r = i + j - \delta_p - \delta_q + k + d,$$

$$r \equiv 1 \pmod{2} : c_r = 2(i - \delta_p) + k + d.$$

$$k = \lceil \sqrt{m+1} \rceil, \quad i = \lfloor m/k \rfloor, \quad j = \lfloor (m-1)/k \rfloor, \quad p = m - ik, \quad q = m - 1 - jk \\ \delta_p = 1 \quad (p=0), \quad 0 \quad (p>0),$$

4.2 可変長演算

本節では、 r 次収束法(3.8)を可変長演算のもとで計算したときの時間計算量を求める。まず、 r 次収束法(3.8)を次のように書き換える：

$$(4.14) \quad x_{k+1} = x_k + \Delta_r(x_k),$$

$$\Delta_r(x_k) = \sum_i \left\{ \binom{r}{i} - \binom{r}{2i+1} \right\} a^i x_k^{r-2i} / B_r(x_k)$$

いま、 x_k が \sqrt{a} の b 進 q 桁の近似値であるとする、 x_k の持つ誤差 e_k と増分 Δ_r との関係は、

$$(4.15) \quad |e_k / \sqrt{a}| \approx |\Delta_r(x_k) / x_k| = O(b^{-q})$$

であるから、増分 Δ_r の先頭桁は x_k のそれよりおおよそ q 桁だけ下位に位置していることがわかる。したがって、 q 桁近似 x_k に増分 Δ_r を加えた値 x_{k+1} を r 桁近似にするためには、増分 Δ_r は上位 $(r-1)q$ 桁だけ計算すれば充分であることがわかる。しかしここでは余裕をみて $r^{1-\delta}q$ 桁($0 \leq \delta < 1$)程度で計算することにする。このような計算を行ったとき、 t 桁の初期値から s 桁の近似を得るための時間計算量 $T_r(t; s)$ は、

$$(4.16) \quad T_r(t; s) = c_r \sum_{i=1}^p M(r^{1-\delta} t)$$

となる。ここで、 $M(N)$ は N の単長増加関数で、 $0 < \alpha < 1$ なる定数と任意の $N > 1$ に対して常に、

$$(4.17) \quad M(\alpha N) < \alpha M(N)$$

が成り立っているものとする。このとき、 $T_r(t; s)$ は

$$(4.18) \quad T_r(t; s) < 2c_r M(s)$$

を満たすことが容易に示される。この式は、可変長演算を用いて計算すると固定長演算の高々反復 2 回分の計算量で全ての計算が完了することを意味している。また、 c_r が

$$(4.19) \quad c_r < K(r-1), \quad r > 1$$

を満たしているとき、

$$(4.20) \quad T_r(t; s) < K r M(s)$$

となり、 r が小さいほど可変長演算では計算時間も少なくなることが示される。

〔数値例〕実際に多倍長演算を用いて平方根を計算してみる。ここでは演算桁数 $N=32768$ とし、乗算のアルゴリズムは時間計算量が $O(N^2)$ となるものを用いた。この演算ルーチンにおける各演算の時間比は、二乗演算：乗算：除算 = 0.49 : 1 : 2.5 であった。ここでは $a=2$ と $a=0.3333\cdots$ (多倍長数) の 2 つの平方根を相対誤差がおおよそ 2.6×10^{-8} となる初期値を与え計算した (図 1)。

参 考 文 献

- 1) Dutka, J: The Square Root of 2 to 1,000,000 Decimals. Math. Comp. Vol. 25, pp. 927-930 (1971).
- 2) 金田康正: 円周率 800万桁及び $1/\sqrt{2}$, $\sqrt{2}$, 1600万桁の検証・統計結果, 数理解析講究録, Vol. 498, pp. 66-108 (1983).
- 3) 小沢一文, 海野啓明: 連分数を用いた平方根の高速発生法とその計算効率, 情報処理学会アルゴリズム研究会資料, SIG-AL-3, pp. 17-24 (1989).
- 4) 和田秀男: 数の世界 (科学ライブラリー), pp. 169-175, 岩波書店, 東京 (1981).
- 5) 野崎昭弘: 計算機数学 (共立数学講座 11), pp. 54-95, 共立出版, 東京 (1984).

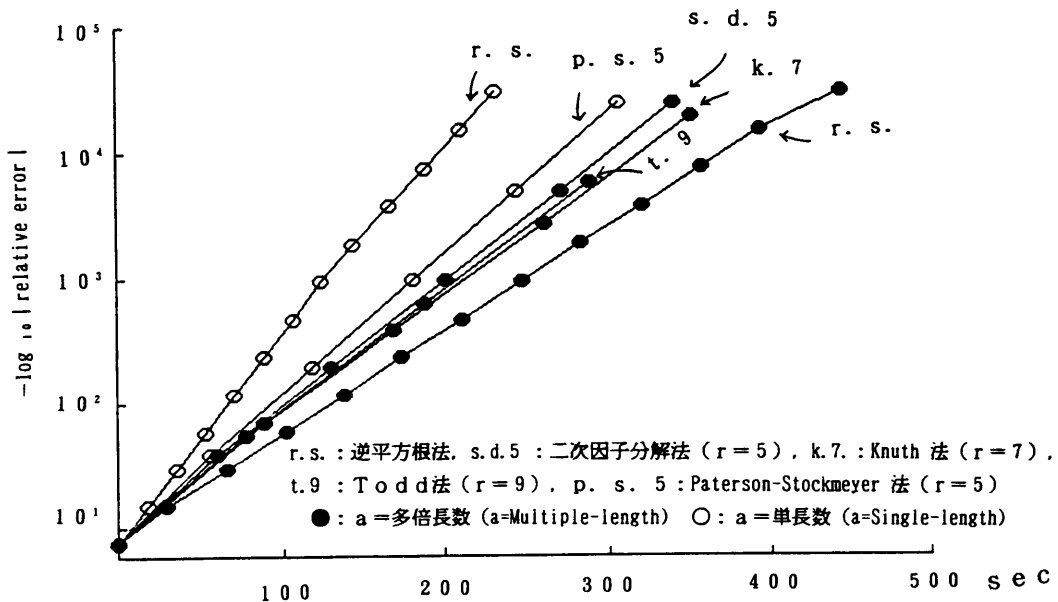


図 1. r 次収束法の相対誤差と計算時間の関係 (固定長演算)