数理解析研究所講究録
676巻 1988年 307-319

近似的代数計算

理化学研究所 佐々木建昭
(Tateaki SASAKI)

1. まえがき

科学技術分野では“計算機による計算”といえば数値計算を意味するのが常識であるが、いくつかの分野では数式処理(計算機による代数的計算)が不可欠な道具になっている。数式処理は、パソコン上で手軽に扱えるようになって以来爆発的に広まりつつあり、近い将来、数値計算と並んで科学技術の広汎な分野で使用されるようになるのが確実である。

数値計算と数式処理の長所・短所を挙げると、

数値計算：高速で、どんなものにも使える柔軟性があり、プログラムも少量ですむ(ことが多い)反面，ほとんどの場合，得られる答が近似的で不完全である。

数式処理：計算に時間がかかり，解法が柔軟性に欠けて適用対象が限られ，プログラム量も膨大になる反面，得られる答は正確で完全である。

すなわち，数値計算と数式処理は相補的であるから，両者の長所をとり入れることにより，有用な計算法が構築できると予想される。

数値計算と数式処理の融合化は以前から試みられ，そのためのシステムもいくつか開発されている。だが，そこにおいて行われていることは，数値計算と数式処理が一つのシステム上で実行されてはいるものの，それらは別の計算として扱われており，いわば“数値計算と数式処理の結合”というレベルにとどまっている。数値計算と数式処理はそれらが算法レベルで融合されたとき最も有効で，最も実り多いものとなろう。

数値計算と数式処理の算法レベルでの融合は以前から大きなテーマとされながら，従来ほとんど研究されてこなかった。筆者らは最近，多項式に対するユークリッドの算法と無平方分解を浮動小数を用いて実行する算法を考案・解析し，それを基に融合算法を考察したが，考察すればするほど，融合算法が当初の予想よりはるかに実り多いものであることを確信するに至った。本稿では，数値数式融合算法のうち明確に規定しうる部分を三つのカテゴリーに分類し，「近似的代数算法」と総称して説明するとともに，いくつかの典型的応用例を示す。

2．近似的代数算法：三つのカテゴリー

数値数式融合算法の全容を現時点で把握することは筆者の

能力を越えるが，代数的算法と密接に係わる部分は比較的明確に把握することができ，以下の三つにまとめた。

① 浮動小数係数の数式を対象とする近似的代数計算；

② べき級数係数の数式を対象とする近似的代数計算；

③ 浮動小数係数の数式を（数値に関して）与えられた精度まで高精度に計算する。

まず①について．$F_1(x), \cdots, F_n(x)$ を浮動小数係数の数式（多変数でもよい）とし，ε を正の微小量，Op を $F_1, \cdots, F_n$ に対する代数的演算とする。

$$Op(F_1(x), \cdots, F_n(x)) = G(x) + O(\varepsilon(x)),$$

$O(\varepsilon(x))$ は係数値が F_i の係数に比して $O(\varepsilon)$ なる数式，

なる関係を満たす $G(x)$ を計算することを「精度 ε の近似的代数計算」と呼ぶ。ε は機械イプシロン（machine epsilon）に選んでもよいが，$\varepsilon = 10^{-3} \sim 10^{-5}$ のように選んでもよい。Op としては GCD や無平方分解，あるいは Gröbner 基底計算など，たいていの代数的演算が対象になりうる。

上記①は，相対的に $O(\varepsilon)$ なる微小な係数項を無視して，代数的計算を実行することを意味する。一方，②はべき級数の高次項を無視して代数的計算を実行することを意味する。$F_1(x, y_1, \cdots, y_v), \cdots, F_n(x, y_1, \cdots, y_v)$ を係数がべき級数環 $K\{y_1, \cdots, y_v\}$ に属する x の数式（多変数でもよい）

とする。

以下，変数 $y_1, \cdots, y_v$ をまとめて $\boldsymbol{y}$ と表わす。S をイデアル $(y_1 - k_1, \cdots, y_v - k_v)$，ただし $k_i \in K$，とする。上記②の近似的算法とは，$F_1, \cdots, F_n$ と代数的演算 Op が与えられたとき，

$$Op(F_1(x, \boldsymbol{y}), \cdots, F_n(x, \boldsymbol{y})) = G(x, \boldsymbol{y}) \pmod{S^m}$$

なる関係を満たす $G(x, \boldsymbol{y})$ を計算することである。

次に，$F_1(x), \cdots, F_n(x)$ は再び浮動小数係数の数式（多変数でもよい）とする。与えられた $F_1, \cdots, F_n$ と演算 Op に対して，

$$Op(F_1(x), \cdots, F_n(x)) = G_m(x) + O(\varepsilon^m(x))$$

なる数式 $G_m(x)$ が計算できたとして，さらに

$$Op(F_1(x), \cdots, F_n(x)) = G_{m+1}(x) + O(\varepsilon^{m+1}(x))$$

なる数式 $G_{m+1}(x)$ を計算したい局面は多く存在する。これは，上記③を逐次的算法として実行するもので，③の典型的算法といえる。

3．浮動小数係数の数式を対象とする近似的代数計算

筆者らは最近，浮動小数係数の1変数多項式を近似的に無平方分解することにより，悪条件代数方程式がうまく解けることを指摘した（文献〔1〕，〔2〕）。多項式 $P(x)$ の無平方分解

とは，

$$P(x) = Q_1(x)\, Q_2^2(x) \cdots Q_\ell^\ell(x),$$

ただし，$P(x)$のm重根はすべてQ_mに含まれる，

なるQ_1，Q_2，…，Q_ℓを構成する算法のことで，数式処理における基本的算法の一つである。この分解により，$P(x)$の重根がその多重度別に分離できる。従来の無平方分解は係数に関して正確な演算を仮定していたが，我々は浮動小数係数の多項式を近似的に扱うことにより，

$$P(x) = Q_1(x)\, Q_2^2(x) \cdots Q_\ell^\ell(x) + O(\varepsilon(x)),$$

ただし，εは正の微小量であり，事前に与える，

なるQ_1，Q_2，…，Q_ℓを構成する算法を与えた。この近似的算法で構成されるQ_mは$P(x)$のm重近接根（m重根も含む）の近似値を根として含むため，重根のみならず近接根が分離できる。文献[1]と[2]にはεの大きさと近接根の近接度との関係が，大雑把ではあるが，解明されている。

代数方程式では重根のみならず近接根も悪条件性の原因となるが，従来，近接根の処理は極めて難しいものとされてきた。これが，近似的代数算法の導入により，きわめて明解に解決されたのである。

近似的GCD算法，あるいはそれを応用した近似的無平方分解算法を多変数多項式に適用することも興味深い（文献[3]）。

簡単のため，２変数多項式 $F(x,y)$ と $G(x,y)$ を考えよう。近似的ＧＣＤ算法をＦとＧに適用すると

$$F(x,y) = D(x,y)\times\tilde{F}(x,y) + \varepsilon_1(x,y),$$
$$G(x,y) = D(x,y)\times\tilde{G}(x,y) + \varepsilon_2(x,y),$$

ただし，ＦとＧの最大係数が $O(1)$ とするとき，ε_1 と ε_2 は最大係数の大きさがたかだか $O(\varepsilon)$ の多項式を意味する，

なる分解が可能である。$D \neq 1$ かつ $\varepsilon_1 \neq 0$, $\varepsilon_2 \neq 0$ であるとし，連立代数方程式

$$\{ F(x,y)=0, \quad G(x,y)=0 \} \tag{I}$$

を考える。この方程式系は，$\varepsilon_1=\varepsilon_2=0$ の場合には次のより簡単な系に帰着する。

$$\{ D=0 \} \quad と \quad \{ \tilde{F}=0, \tilde{G}=0 \}. \tag{II}$$

このうち第一の系は無限個の解を与え，第二の系は一般に有限個の解を与える。この状況は微小項 ε_1 と ε_2 の存在により一変し，方程式系(I)は一般に有限個の解しか持たない（もちろん，場合によるが）。したがって，方程式系(I)は数値解法にとっては ill-conditioned である。実際，ＦとＧのヤコビアンは $D=0$ の近傍で小さな値（$O(\varepsilon)$程度）になることが分る。

ところで，近似的ＧＣＤにより D, $\tilde{F}$, $\tilde{G}$ が計算できれば，

$$\begin{aligned} H(x,y) &\equiv \tilde{G}(x,y)\,F(x,y) - \tilde{F}(x,y)\,G(x,y) \\ &= \tilde{G}(x,y)\,\varepsilon_1(x,y) - \tilde{F}(x,y)\,\varepsilon_2(x,y) \end{aligned}$$

なる多項式Hが構成できる。(I)の解はすべてH＝0とするから，(I)のかわりにたとえば

$$\{F(x,y)=0,\ H(x,y)=0\} \qquad (\mathrm{III})$$

を解けば(I)の解がすべて得られる。(III)は一般に(I)のような悪条件性をもたないと期待できるから，数値的には(I)より解き易い。

上記の(I)は悪条件連立代数方程式のほんの一例であり，一般の悪条件代数方程式系は上述の簡単な方法では処理できない。しかしながら，多項式イデアルのGröbner基底(標準基底ともいう)の計算を近似化するならば，より広範囲の悪条件代数方程式系が処理できる可能性があり，現在研究を進めている所である。

4. べき級数係数数式を対象とする近似的代数計算

べき級数の一定次以上の次数項を無視する近似的算法に対しては，机上計算では使われなかった効率的，かつ有効な算法が数式処理の分野で開発されている。それらは，1変数多項式に対するヘンゼル構成と多変数多項式への拡張，記号的ニュートン法などである。これらは数式処理で既によく研究

されたテーマであるが、数値計算の算法と組み合わせることにより種々の発展が期待できる。

たとえば、微分方程式の解法と組み合せた記号的テイラー級数法は旧知のものであるし（文献[4]），準特異的（$O(\varepsilon)$の項を無視すれば特異的となる）行列に関する演算，あるいは長方形行列の一般逆行列（generalized inverse）なども，行列要素に記号を導入し，その記号を微小量として扱うことによりうまく処理できることが多い（たとえば文献[5]を見よ）。この場合，べき級数の高次項を捨てることにより，正確な計算に比して圧倒的に高速に実行できる。

5．浮動小数係数の数式を高精度に計算すること

従来，数値計算では固定精度数値表現を用いて，その精度で可能な計算のみを対象とすることがほとんどであった。最近になってようやく，区間算術を用いることにより，計算された答の精度を検証すること（いわゆるself-validating算法）が注目を集めるようになった。一方，数式処理においては，厳密に正しい数値を計算するため，任意精度の整数・有理数演算を実行することが常識になっている。

現実の問題では，何百桁もの厳密に正しい有理数（それを計算するには途中でそれより一層巨大な数を扱うことが多い）

を計算するかわりに，何十桁かの近似値を求めれば十分な場合が多い。このような場合には，答の精度が判定できて，精度が足りないときにはさらに精度の高い答を計算できることが必要である。一般に悪条件問題の多くは著しい桁落ちをひき起こすので，桁落ちの程度をモニターしながら答を高精度化する算法の開発が望まれる。

筆者らは，桁落ちのため著しい精度低下がひき起こされる例としてスツルム列（Sturm sequence）を考察し，逐次的に精度を向上させる算法を考案した（文献〔6〕）。スツルム列とは1変数多項式 $P(x)$ とその導関数 $dP(x)/dx$ から構成される多項式剰余列（ただし，剰余の符号を逆転する）であるが，$P(x)$ が近接根をもつ場合には剰余列の係数が著しい桁落ちを起こすことが知られている（詳しい解析は文献〔2〕を見よ）。

$P(x)=P_1$ と $dP(x)/dx=P_2$ から構成されるスツルム列を

$$(P_1,\ P_2,\ P_3,\ \cdots,\ P_k,\ \cdots),\quad deg(P_i)>deg(P_{i+1}),$$

とするとき，P_k は P_1 と P_2 により以下のように表わされる。

$$P_k=A_kP_1+B_kP_2,\quad A_k \text{ と } B_k \text{ は多項式},$$
$$deg(A_k)<deg(P_2)-deg(P_k),$$
$$deg(B_k)<deg(P_1)-deg(P_k).$$

通常，P_k は $P_3\to P_4\to\cdots\to P_k$ と剰余列を順に計算することにより計算されるが，文献〔6〕には

$$P_k^{(1)} = A_k^{(1)} P_1 + B_k^{(1)} P_2 + O(\varepsilon(x))$$

なる"初期値"$P_k^{(1)}$が$P_3^{(1)} \to P_4^{(1)} \to \cdots \to P_k^{(1)}$と計算できれば，以後は$P_3, \cdots, P_{k-1}$を経由することなく，直接的に

$$P_k^{(m)} = A_k^{(m)} P_1 + B_k^{(m)} P_2 + O(\varepsilon^m(x)), \quad m=2,3,\cdots$$

なる$P_k^{(m)}$を計算する算法が記述されている。

数式の逐次的高精度化の手法がさらに有効に働く例は連立代数方程式の代数的解法であろう。連立代数方程式を代数的に解く代表的算法はGröbner基底を計算することである。ところが，オーソドックスな方法では，ごく小規模の問題でない限り，中間式の係数が膨張して計算不能に陥ることがしばしばである。係数成長の程度が比較的少ないオーダリングを用いる方法（文献〔7〕，〔8〕）や，モジュラー算法により中間係数膨張を避ける方法（文献〔9〕）も考案されているが，最終結果が何百桁もの係数を含めばそれだけのものを計算せざるを得ない。一方，理工学では，このような方程式の解として，せいぜい10桁も精度があれば十分である。このような場合には，係数を浮動小数で扱う算法が極めて実際的である。

一般的に言って，高精度に数値を扱う必要のある問題では著しい桁落ちが生じていることが多く，精度低下をモニターできることが是非望ましいことは上述した。したがって，近似的代数算法では精度低下をモニターできる任意多倍長浮動

小数ルーチンが是非欲しいが，そのようなルーチンはFORTRANでも容易に作成可能である（文献〔10〕を見よ）.

6. あとがき

近似的代数算法では，たとえば代数的算法を浮動小数係数数式に適用する場合，従来の算法のままでは不十分で，数値の振舞いに対する理論的解析の裏付けのもとに算法を工夫して初めて十分であると言える。また，従来の数値算法に変数をもちこむだけでもかなり大がかりな融合計算システムを必要とする。その意味で，数値数式の融合算法は数値解析と数式処理の両分野に深くまたがるが，従来ほとんど研究されたことのない魅力にあふれた分野である。本稿では，近似的代数算法の手始めとして，ありふれた算法をごく大雑把に考察したにすぎないが，この分野が実り多いものであることを理解するには十分であると思う。

参考文献

〔1〕 Sasaki, T. and Noda, M.T., "Approximate Square-free Decomposition and Root-Finding of Ill-conditioned Algebraic Equations", J. Inf. Proces. (to appear).

〔2〕 佐々木建昭，野田松太郎，佐々木睦子，“浮動小数係

数多項式剰余列の解析", 情報処理学会・数値解析研究会報告集 #26, 1988年10月; このうち, [1]とオーバーラップしない部分は Sasaki, T. and Sasaki, M., "Analysis of Accuracy Decreasing in Polynomial Remainder Sequence with Floating-point Number Coefficients", RIKEN preprint,

にまとめられている。

[3] 越智正明, 野田松太郎, 佐々木建昭, "多変数多項式の近似的GCDとその応用", 数理研研究集会「数式処理と数学研究への応用報告集(1989年2月発刊予定)。

[4] Geddes, K.O., "Convergence Behavior of the Newton Iteration for the First Order Differential Equations", Lecture Notes in Comp. Sci. Vol. 72 (Springer-Verlag), p.189 (1979).

[5] 野田松太郎, 越智正明, "一般逆行列の数式処理的解法について", 数理研研究集会「数式処理と数学研究への応用」報告集(講究録646, 1988年2月).

[6] Suzuki, M. and Sasaki, T., "Iteratively Increasing the Accuracy of Coefficients of Sturm Sequence", RIKEN preprint (in preparation).

[7] Kobayashi, H., Moritsugu, S., and Hogan, R.W., "Solving Systems of Algebraic Equations", Proc. ISSAC'88 (to appear).

[8] Sasaki, T., "Some Algebraic Algorithms based on Head Term Elimination over Polynomial Rings", Proc. EUROCAL'87

(Lecture Notes in Comp. Sci., Springer-Verlag).

〔9〕 Sasaki, T. and Takeshima, T., "A Modular Method for Gröbner-basis Construction over $\mathbb{Q}$ and Solving System of Algebraic Equations", RIKEN preprint (Oct. 1988).

〔10〕 佐々木建昭，鈴木正幸，"精度低下をモニターできる任意多倍長浮動小数パッケージの設計"，研究メモ，1988年11月.