

近似グレブナー基底の二つの応用

Two Applications of Approximate Gröbner Bases

佐々木 建昭 (Tateaki Sasaki), 稲葉 大樹 (Daiju Inaba) *
筑波大学 名誉教授, 財団法人 日本数学検定協会

Abstract

筆者の一人 (T.S) は最近、近似グレブナー基底を定義したが、そこでは近似線形従属関係が本質的であった。本稿では、与えられた基底要素である多項式間には近似線形従属関係が存在するとの前提で、近似グレブナー基底の二つの応用を記述する。第一の応用は“近似特異系の検出と特異化”で、第二の応用は“悪条件連立代数方程式の分類と良条件化”である。近似特異系とは「基底要素の数係数を適当に微小摂動するとイデアルの次元が大きくなる系」と定義する。そして、系が近似特異であるための必要条件を与え、その場合の検出法と特異化の算法を与える。悪条件連立代数方程式としては 1) 方程式系が近接解を持つ場合が有名だが、本稿ではさらに、2) 方程式系が近似特異な場合、3) グレブナー基底の計算で微小主項が現れる場合、4) その他の場合、を考察する。そして、場合 2) に関しては系を良条件化する方法を提案する。

1 はじめに

$F_1, \dots, F_r$ は体 K 上の多項式環 $K[x, y, \dots, z]$ の元とする。 $F_1, \dots, F_r$ を生成元とするイデアル $\langle F_1, \dots, F_r \rangle$ とは $\{A_1 F_1 + \dots + A_r F_r \mid \forall A_i \in K[x, y, \dots, z]\}$ なる集合である。このイデアルの中には $a_1 F_1 + \dots + a_r F_r = \delta F$, $\|\delta F\| = \varepsilon \max\{\|a_1 F_1\|, \dots, \|a_r F_r\|\}$ ($0 < \varepsilon \ll 1$) を満たす要素が存在し得る ($\|\cdot\|$ はノルムを表す; 2 章を参照)。このとき、 $a_1 F_1 + \dots + a_r F_r$ を許容度 ε の近似線形従属関係と呼ぶことにする。

現在、世界中で多くの研究者が浮動小数係数多項式を生成元とするグレブナー基底に取り組んでいるが、筆者らはそれを浮動小数グレブナー基底と呼ぶ (命名は [10] による)。浮動小数グレブナー基底は、たとえば Buchberger 算法で従来と同じ基底が計算できれば良しとする研究者が多く、得られた基底の各多項式にどれ位の誤差が生じたかを気にする者はごく少数である。しかしながら、与えられた多項式によっては、多項式間に近似線形従属関係が存在し、浮動小数グレブナー基底計算で多項式の係数の精度が必然的に大きく損なわれる場合がある。さらに、浮動小数係数多項式が生成元の場合、従来のイデアルの概念自体が破綻するので、近似イデアル の概念を定義する必要もある。このような立場

* sasaki@math.tsukuba.ac, d.inaba@su-gaku.net

からグレブナー基底を捉えたのが筆者らの近似グレブナー基底である [7]。従来の研究については [10, 12, 8, 3, 9, 6] 等を参照されたい。

近似グレブナー基底論は生まれたばかりで、どのような応用があるのか皆目分らないというのが現状であろう。そこで、本稿では簡単な二つの応用を述べる。

第一の応用は“近似特異系”である。筆者の一人 (T.S) は 2004 年、近似特異な多項式を定義し、その特異化を提唱した。ここで、近似特異な多項式とは、「与えられた多項式は特異点を持たないが、数係数の微小な摂動で特異点を持つようになるもの」と定義した。近似特異系とはこの概念を多変数多項式系 (有限集合) に拡張したものである。第 3 章で定義を述べ、基本的性質を説明するとともに、特異化の算法を与える。

第二の応用は悪条件連立代数方程式の分類と良条件化である。1 変数代数方程式は多くの場合、数値計算で簡単に解が計算できるが、ある種の方程式はよく知られた数値計算法を適用すると計算が不安定になったり、計算に多大な時間がかかったりする。そのような方程式は (数値的に) 悪条件方程式と呼ばれている。連立代数方程式にも数値的に解くのが難しいものがあるが、現在までに研究されたのは、1) 重解・近接解を持つ系、2) 所与の多項式が近似 GCD (最大公約子) を持つ系 [4]、くらいである。第 4 章では、グレブナー基底の観点から (著者らの知識の範囲で) 悪条件の連立代数方程式の分類を行う。1 変数多項式の場合、かつて Wilkinson が「ごく微小な係数摂動で根が大きく変動する多項式」を与えて当時の研究者に衝撃を与えたが、第 4 章を読めば連立代数方程式にも同じような変動を示すものがあることが分るだろう。

第 5 章では、近似線形従属関係と近似特異系の概念は、“近似代数幾何”とも呼ぶべき新しく魅力的な分野への突破口となるであろうことを指摘する。

2 復習：近似イデアルと近似グレブナー基底

固定計算精度の浮動小数の集合を $\mathbb{F}$ と表す。変数 $x_1, \dots, x_\nu$ を $\mathbf{x}$ と表し、 $\mathbb{F}[\mathbf{x}]$ の要素を P, Q などと表す。 $\|P\|$ は多項式 P の ノルム を表す：本稿では無限大ノルム (係数の絶対値の最大値) を採用する。多項式 P に現れる べき積 (変数のべきの積) 全体の集合を $\text{supp}(P)$ と表す。多項式集合 Φ の各要素の先頭のべき積 (順序が最大のもの) の集合を 主項集合 といい $\text{LT}(\Phi)$ と表す。 P と Q の S 多項式 を $\text{Spol}(P, Q)$ と表し、 P の Q による 主項簡約 を $\text{Lred}(P, Q)$ と表し $P \xrightarrow{Q}$ と図示する。 $P \xrightarrow{Q} \tilde{P}$ は $\tilde{P}$ が Q 既約になるまでの簡約を表す。浮動小数 f が誤差 e を含むとき、 $|e/f|$ を f の 精度 といい $\text{acc}(f)$ と表す。 e は未知だが、大雑把な大きさは分っているとす。浮動小数 f と g は同符号で、上位 k ビットが同じで次のビットが異なるとする。このとき、 $f - g$ では上位 k ビットがキャンセルし誤差が 2^k 倍に拡大される。これを大きさ 2^k の 桁落ち という。

与えられた初期基底を $\Phi = \{F_1, \dots, F_r\} \subset \mathbb{F}[\mathbf{x}]$ とし各多項式の初期精度を $\varepsilon_{\text{init}}$ とする。もしも $P = a_1 F_1 + \dots + a_r F_r, \forall a_i \in \mathbb{C}[\mathbf{x}], \|P\| < \varepsilon_{\text{init}} \max\{\|a_1 F_1\|, \dots, \|a_r F_r\|\}$ となる近似線形従属関係が存在すれば、 P は各係数が誤差のみの多項式で無意味である。すなわち、従来のイデアルの概念は $\mathbb{F}[\mathbf{x}]$ では破綻する。では、桁落ちが $1/\varepsilon_{\text{init}}$ 未満の多項式を全て集めればよいかというと、そう簡単ではない。シジジー ($a_1, \dots, a_r$) には

$b_1 F_1 + \cdots + b_r F_r = 0$ となる成分 $(b_1, \dots, b_r)$ が無数に含まれ得るからである。そこで、 P を与えるシジジーの中でノルムが極小の 極小シジジー $(A_1, \dots, A_r)$ を定義し、 $\|P\| < \varepsilon_{\text{app}} \max\{\|A_1 F_1\|, \dots, \|A_r F_r\|\}$, $\varepsilon_{\text{init}} \leq \varepsilon_{\text{app}} \ll 1$, のとき P は許容度 ε_{app} で 近似零 であると定義して、 $P = 0$ (tol ε_{app}) と表す。(第1章の頭で述べた近似線形従属関係の許容度も上述のように修正)。その上で、[7] では近似イデアルが次のように定義された。

定義1 (近似イデアル) 多項式 $F_1, \dots, F_r \in \mathbb{F}[x]$ は $\|F_1\| = \cdots = \|F_r\| = 1$ と規格化されており、それらの初期精度を $\varepsilon_{\text{init}}$ とする。下記集合を $F_1, \dots, F_r$ で生成される精度 $\varepsilon_{\text{init}}$ の近似イデアルといい、従来のイデアル $\langle F_1, \dots, F_r \rangle$ に倣い $\langle F_1, \dots, F_r; \varepsilon_{\text{init}} \rangle$ と表す。

$$\{P = A_1 F_1 + \cdots + A_r F_r \mid P \neq 0 \text{ (tol } \varepsilon_{\text{init}}), (A_1, \dots, A_r) \text{ は極小シジジー}\}. \quad \square \quad (2.1)$$

近似イデアルを定義できれば、近似グレブナー基底 は無近似の場合の定式化を倣って定式化できる。ただ一つの問題は、近似イデアルには精度が落ちた多項式も含まれるが、それらが近似グレブナー基底により与許容度で近似ゼロに簡約できることを如何に保証するかである。我々は、従来の項簡約に替えて 精度防御簡約 と命名した新たな項簡約を導入することでこれを保証する。精度防御簡約とは、 P を Q で簡約する場合、簡約子 Q としては P より精度がよいか同等のものだけを使うことである。この簡約を $P \xrightarrow{Q} \cdot$ と図示する。精度防御簡約の導入により、当然、近似グレブナー基底は浮動小数グレブナー基底とは異なり一見、冗長な要素を含むものとなる。

定義2 (近似グレブナー基底) $\Phi = \{F_1, \dots, F_r\} \subset \mathbb{F}[x]$ は初期精度 $\varepsilon_{\text{init}}$ の初期基底で、 $\varepsilon_{\text{init}} \leq \varepsilon_{\text{app}} \ll 1$ とする。 $\Gamma = \{G_1, \dots, G_s\} \subset \mathbb{F}[x]$ は、下記2条件を満足するとき、近似イデアル $\langle F_1, \dots, F_r; \varepsilon_{\text{init}} \rangle$ の許容度 ε_{app} の近似グレブナー基底であるという。

$$(1) \langle F_1, \dots, F_r; \varepsilon_{\text{init}} \rangle = \langle G_1, \dots, G_s; \varepsilon_{\text{init}} \rangle,$$

$$(2) \text{Spol}(G_i, G_j) \xrightarrow{\Gamma} 0 \text{ (tol } \varepsilon_{\text{app}}) \quad (\forall i \neq j).$$

□

3 近似特異系と特異化

与えられた多項式集合を $\Phi = \{F_1, \dots, F_n\}$ とする。 Φ の定める 代数多様体 $\text{variety}(\Phi)$ とは連立代数方程式 $\{F_1=0, \dots, F_n=0\}$ の解全体の集合であり、イデアル $\langle \Phi \rangle$ の 次元 $\dim(\Phi)$ とは $\text{variety}(\Phi)$ の次元である。たとえば、解全体が有限個の集合なら次元は0であり、一つのパラメータで表されるなら次元は1である。グレブナー基底論では $\mathbb{C}$ 上のイデアルの次元を簡単に計算する次の方法が考案されている; 文献 [1] の第9章参照。

Procedure $\dim\text{variety}(\Phi) ==$

Step1: Compute a Gröbner basis Γ of Φ
w.r.t. the total-degree order;

Step2: Return dimension of $\text{variety}(\text{LT}(\Gamma))$.

注釈1 上記 $\text{LT}(\Gamma)$ は単項式集合であり、 $\text{variety}(\text{LT}(\Gamma))$ の次元は容易に計算できる。なお、上記の方法は近似グレブナー基底算法で計算された Γ にも適用できる。 □

以下では、入力多項式 $F_1, \dots, F_n$ は次のように規格化されているとする。

$$\Phi = \{F_1, \dots, F_n\}, \quad \|F_1\| = \dots = \|F_n\| = 1. \quad (3.1)$$

定義3 (近似特異系) ε は正の微小数とし、 $\delta F_1, \dots, \delta F_n$ はノルムが ε 以下の多項式とする。 Φ の各多項式をそれぞれ $\delta F_1, \dots, \delta F_n$ で摂動させた系を Φ_ε とする：

$$\Phi_\varepsilon = \{F_1 + \delta F_1, \dots, F_n + \delta F_n\}, \quad \max\{\|\delta F_1\|, \dots, \|\delta F_n\|\} = \varepsilon. \quad (3.2)$$

$D = \dim(\text{variety}(\Phi))$ 、 $D_\varepsilon = \dim(\text{variety}(\Phi_\varepsilon))$ とする。 $\delta F_1, \dots, \delta F_n$ をうまく選んだとき $D_\varepsilon > D$ となるならば Φ は許容度 ε の近似特異系であるという。□

本章では、近似特異系 Φ が与えられたとき、次の二つの問題を考える。

問題1) Φ が近似特異系であることを如何に検出するか？

問題2) Φ を ε を小さくしつつ如何に特異系 Φ_ε に変換するか？

補題1 $\Phi' = \{F_2, \dots, F_n\}$ とし、線形従属関係 $A_1 F_1 + A_2 F_2 + \dots + A_n F_n = 0$ 、 $A_1 \neq 0$ 、が存在するとする。このとき、次式が成立する。

$$\text{variety}(\Phi) = \text{variety}(\Phi') \setminus \text{variety}(\{A_1, F_2, \dots, F_n\}). \quad (3.3)$$

証明 代数多様体の定義より、 $\text{variety}(\Phi') = \text{variety}(\{A_1 F_1 + \dots + A_n F_n, F_2, \dots, F_n\})$
 $= \text{variety}(\{A_1 F_1, F_2, \dots, F_n\}) = \text{variety}(\{A_1, F_2, \dots, F_n\}) \cup \text{variety}(\Phi)$ 。この式から (3.3) が直ちに得られる。□

この補題は、 $F_1, \dots, F_n$ の間に線形従属関係が存在することは、非常に荒っぽく言うならば、 Φ から一つの多項式を除去することに等しい。 Φ から一つの多項式を除去すれば、多くの場合、多様体の次元は増加する。そこで、次の疑問が生じる：系が近似特異であるためには、近似線形従属関係の存在は必要なのだろうか？、十分なのだろうか？

定理1 (主定理1) イデアル $\langle \Phi \rangle$ の許容度 ε の近似グレブナー基底を全次数順序で計算するとき、計算中の多項式がノルム ε 未満となって除去される場合を除き、ノルム ε 未満の摂動 $(\delta F_1, \dots, \delta F_n)$ で多項式の主項が消えることはないとする。このとき、 $F_1, \dots, F_n$ に関する許容度 ε の近似線形従属関係の存在することは、 Φ が許容度 $O(\varepsilon)$ の近似特異系であるための必要条件である。

証明 Φ と Φ_ε の全次数順序に関する許容度 ε の近似グレブナー基底をそれぞれ $\Gamma, \Gamma_\varepsilon$ とする。もしも許容度 ε の近似線形従属関係が存在しなければ、計算の過程で多項式が除去されることはないので、主項に関する仮定より $\text{LT}(\Gamma_\varepsilon) = \text{LT}(\Gamma)$ となる。このことは $\dim(\text{variety}(\Phi_\varepsilon)) = \dim(\text{variety}(\Phi))$ を意味する。定理はこの対偶に他ならない。□

近似線形従属関係の存在は十分条件ではない。このことを例で示す。

例 1 (主定理 1 の逆が成立しない例) 次の系 Φ を考える。

$$\Phi = \begin{cases} F_1 := y(1xy - 30001/10000y)/3, \\ F_2 := z(2xz - 9999/10000z)/2, \\ F_3 := yz((1xy - 3y) - (2xz - z))/3. \end{cases}$$

Φ のグレブナー基底 (順序は全次数または辞書式) は $\{G_1 = xy^2 - 30001/10000y^2, G_2 = xz^2 - 9999/20000z^2, G_4 = yz^2, G_5 = y^2z\}$ となり、代数多様体として $\text{variety}(\Phi) = \{(\forall a, 0, 0)\} \cup \{(30001/10000, \forall a, 0)\} \cup \{(9999/20000, 0, \forall a)\}$, with $a \in \mathbb{C}$, を得る。一方、 F_1, F_2, F_3 間には許容度 $O(0.0001)$ の近似線形従属関係 $zF_1 + 2yF_2/3 - F_3 = (-y^2z + yz^2)/30000$ が存在することが容易にわかる。

線形従属関係 $zF'_1 + 2yF'_2/3 - F'_3 = 0$ を満たす次の系を考えよう：

$$\Phi_\varepsilon = \begin{cases} F'_1 := y(1xy - 3y)/3, \\ F'_2 := z(2xz - z)/2, \\ F'_3 := yz((1xy - 3y) - (2xz - z))/3. \end{cases}$$

Φ_ε の (全次数順序または辞書式順序) でのグレブナー基底は $\{G'_1 = xy^2 - 3y^2, G'_2 = xz^2 - z^2/2, G'_4 = y^2z^2\}$ となり、 $\text{variety}(\Phi_\varepsilon) = \{(\forall a, 0, 0)\} \cup \{(3, \forall a, 0)\} \cup \{(1/2, 0, \forall a)\}$, with $a \in \mathbb{C}$, を得る。以上より $D = D_\varepsilon = 1$ である。 $\square$

近似特異系 $\Phi = \{F_1, \dots, F_n\}$ を特異系 $\Phi_\varepsilon = \{F_1 + \delta F_1, \dots, F_n + \delta F_n\}$ に変形することは、近似線形従属関係が見つければ、以下のように容易である。その近似線形従属を

$$R: A_1F_1 + \dots + A_nF_n = \delta F, \quad \|\delta F\| / \max\{\|A_1\|, \dots, \|A_n\|\} = \varepsilon, \quad (3.4)$$

とする。ここで、多項式 A_i ($i = 1, \dots, n$) は既知であり、べき積 $U_{i,1}, \dots, U_{i,m_i}$ により $A_i = a_{i,1}U_{i,1} + \dots + a_{i,m_i}U_{i,m_i}$ と表されるとする。さらに、

$$\cup_{i=1}^r [\cup_{j=1}^{m_i} \text{supp}(U_{i,j}F_i)] = \{T_1, T_2, \dots, T_{\bar{n}}\}, \quad T_1 \succ T_2 \succ \dots \succ T_{\bar{n}}, \quad (3.5)$$

によりべき積 $T_1, T_2, \dots, T_{\bar{n}}$ を定めれば、各 F_i は次式のように表される。

$$F_i = c_{i,1}T_{i,1} + c_{i,2}T_{i,2} + \dots + c_{i,n_i}T_{i,n_i}, \quad i \in \{1, \dots, n\}. \quad (3.6)$$

摂動 $\delta F_1, \dots, \delta F_n$ は次のように決定することができる。未知係数 $d_{i,j}$ ($i=1, \dots, n; j=1, \dots, n_i$) を用いて各 δF_i を次のように表す。

$$\delta F_i = d_{i,1}T_{i,1} + d_{i,2}T_{i,2} + \dots + d_{i,n_i}T_{i,n_i}, \quad i \in \{1, \dots, n\}, \quad (3.7)$$

$\delta F_1, \dots, \delta F_n$ は $A_i(F_1 + \delta F_1) + \dots + A_n(F_n + \delta F_n) = 0$ 、すなわち

$$A_1\delta F_1 + \dots + A_n\delta F_n = -\delta F. \quad (3.8)$$

を満たすように決めればよい。各単項式 T_j の係数を 0 と置けば、上式から未知係数 $d_{i,j}$ に関する連立線形方程式が得られる。一般に方程式の個数より未知係数の個数が大きいので、 $\delta F_1, \dots, \delta F_n$ 全体のノルムを最小化する形で各 δF_i を決めることができる。

4 悪条件連立代数方程式と良条件化

本章では、 $\nu = n$ で $\dim(\text{variety}(\Phi)) = 0$ と仮定、すなわち、 n 変数の連立 n 方程式系は有限個の解を持つと仮定する。

4.1 悪条件連立代数方程式の分類

1 変数の場合、代数方程式で悪条件なものは大雑把に言って二つの型に分類される：

近接根型: 多項式が近接根を持つ場合 (注: $\mathbb{C}$ 上での重根は $\mathbb{R}$ 上では近接根となる)。

Wilkinson 型: 多項式の根自体は互いに十分離れているのだが、係数のごく微小な変化が幾つかの根を大きく変動させる。

入力多項式の係数が正確な場合、 m -多重根因子, $m \in \{1, 2, \dots\}$, は無平方分解で分離できる。そのような多項式は、前処理として無平方分解を行いさえすれば、各無平方因子が近接根を持つ場合に帰着される。無平方で近接根をもつ多項式に対しては、Sasaki-Noda が、近似無平方分解により各近接根因子を分離して良条件の多項式に変換する方法を提案している [11]。さらに、Wilkinson 型の多項式に対しては Fortune が一般同伴行列を利用する素晴らしい方法を考案している [2]。すなわち、1 変数の場合には悪条件代数方程式はほぼ攻略されたと言える。

著者らは、多変数の悪条件代数方程式系を次のように分類する。

近接解型: 代数多様体 $\text{variety}(\Phi)$ が近接解を持つ系。

近似特異型: 入力系が近似特異な場合。

微小主項型: 入力多項式の幾つかの係数の微小な摂動がグレブナー基底の計算で幾つかの主項を 0 にし、結果として幾つかの解に大きな変動をもたらす場合。

その他の型: 現在、ほとんど認識されていない悪条件な系。多変数 Wilkinson 型多項式、すなわち、巨大係数を持ち激しく振動する多項式を含む系、もこれに含める。

読者に近似特異型をよく理解してもらうため、近接解型を簡単に説明する。解の一つを $(\hat{\mathbf{x}}) = (\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_n)$ とし、点 $(\mathbf{x})$ が解 $(\hat{\mathbf{x}})$ の δ -近傍にあると仮定する (δ は微小な正数): $\hat{x}_i = x_i + \delta_i$, $\delta_i = O(\delta)$ ($i=1, \dots, n$)。 $F_i(\mathbf{x} + \delta)$ を $\mathbf{x}$ で Taylor 展開すれば、次式を得る。

$$F_i(\hat{\mathbf{x}}) = 0 = F_i(\mathbf{x} + \delta) = F_i(\mathbf{x}) + \partial F_i / \partial x_1 \delta_1 + \dots + \partial F_i / \partial x_n \delta_n + O(\delta^2). \quad (4.1)$$

$F_i(\mathbf{x} + \delta) = 0$ ($i=1, \dots, n$) を $O(\delta^2)$ -項を無視して $\delta_1, \dots, \delta_n$ について解くと、

$$\begin{pmatrix} \delta_1 \\ \vdots \\ \delta_n \end{pmatrix} \approx -J(\mathbf{x})^{-1} \begin{pmatrix} F_1(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ F_n(\mathbf{x}) \end{pmatrix}, \quad \text{where } J(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \partial F_1 / \partial x_1 & \dots & \partial F_1 / \partial x_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \partial F_n / \partial x_1 & \dots & \partial F_n / \partial x_n \end{pmatrix}, \quad (4.2)$$

を得る。 $(\hat{\mathbf{x}})$ が多重解なら $F_i(\mathbf{x}) = f_i(\hat{x}_1 - \delta_1)^{\mu_1} \dots (\hat{x}_n - \delta_n)^{\mu_n} + O(\delta^2)$ ($f_i \in \mathbb{C}$ で $\mu_1, \dots, \mu_n$ のどれか一つは 2 以上) なる展開がどれかの i について成立する。したがって、 $J(\mathbf{x})$ の

第 i 行は解 $(\hat{x})$ の近傍で非常に小さくなる。 (δ) と $J(x)$ との間のこの関係は、陰関数においても多変数ニュートン法においても基本的であるので、悪条件性の一つをヤコビアン行列 $J(x)$ が近似的に特異になる場合、と定義するのは合理的であろう。

次に近似特異型を考察する。2変数の場合、 $\Phi = \{F_1, F_2\}$ が近似特異なら近似従属関係 $A_1 F_1 + A_2 F_2 = \delta F$, $\|\delta F\| \ll \max\{\|A_1\|, \|A_2\|\}$, が存在するので、 F_1 と F_2 は近似 GCD を持つ。この場合は Ochi-Noda-Sasaki[4] により 1991 年に扱われた。しかし、 Φ が 3 個以上の方程式からなる場合には、系のどの二つの多項式も近似因子を持たないが全体としては近似線形従属関係を持つ場合がある。したがって、近似特異型は Ochi-Noda-Sasaki が扱った悪条件方程式系の一般化である。

系が近接解を持つ場合、ヤコビアン行列が近接解の近傍で近似特異になることを見た。系が近似特異な場合には、ヤコビアン行列はある曲線あるいは曲面上の任意の点の近傍で近似特異になることを示す。 Φ は近似特異であるとする。主定理 1 より近似線形従属関係が存在するので、それを (3.4) とする。前章に述べた方法により Φ から特異系 Φ_ε を計算できるが、 Φ_ε では線形従属関係は正確である。すなわち、次の関係式が得られる。

$$A_1(F_1 + \delta F_1) + \cdots + A_n(F_n + \delta F_n) = 0. \quad (4.3)$$

定理 2 ヤコビアン行列 $J(x)$ は、(4.3) と $A_i(x) \neq 0$ ($i \in \{1, \dots, n\}$) を満たす任意の点 (x) の近傍で近似特異となる。

証明 (4.3) より、各 $i \in \{1, \dots, n\}$ に対して次の関係式が得られる。

$$A_1 \frac{\partial F_1}{\partial x_i} + \cdots + A_n \frac{\partial F_n}{\partial x_i} = - \left(F_1 \frac{\partial A_1}{\partial x_i} + \cdots + F_n \frac{\partial A_n}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial (A_1 \delta F_1 + \cdots + A_n \delta F_n)}{\partial x_i}.$$

この関係式を多様体 $\text{variety}(\Phi_\varepsilon)$ 上の点 (z) で考える。各 $i \in \{1, \dots, n\}$ に対し $F_i(z) + \delta F_i(z) = 0$ であるから、 $|F_i(z)| = O(\varepsilon)$ である。すなわち、

$$A_1(z) \partial F_1(z) / \partial x_i + \cdots + A_n(z) \partial F_n(z) / \partial x_i = O(\varepsilon) \quad \text{for any } i.$$

これは $J(z)$ の n 個の行が近似線形従属であることを意味する。同じことは (z) の近傍の任意の点 (z') にも成立する。□

第三の型の系は、係数の微小な摂動が解の巨大な変動をひき起こすという点で 1 変数 Wilkinson 多項式と同じであるが、悪条件性の由来は全く異なる。簡単な例で説明する。

例 2 (微小主項型の悪条件系) 次の三つの系を考える。

$$\Phi: \begin{cases} F_1 = x^2 y + 101/100 x y + 101 x + 200, \\ F_2 = x y^2 + 100/100 y^2 + 100 y - 201. \end{cases} \quad (4.4)$$

$$\Phi': \begin{cases} F'_1 = x^2 y + 100/100 x y + 101 x + 201, \\ F'_2 = x y^2 + 100/100 y^2 + 101 y - 201. \end{cases} \quad (4.5)$$

$$\Phi'': \begin{cases} F''_1 = x^2 y + 100/100 x y + 100 x + 201, \\ F''_2 = x y^2 + 101/100 y^2 + 101 y - 200. \end{cases} \quad (4.6)$$

どの系も近似特異ではないことに注意されたい。 Φ, Φ', Φ'' は係数が少し違うだけだが、辞書式順序でのグレブナー基底は次のように大きく異なる。

$$\begin{aligned} \Gamma: & \begin{cases} G_1 = y^4 - 19800y^3 + 29899y^2 + 1989900y - 4040100, \\ G_2 = x + 1/4040100y^3 - 6667/1346700y^2 + 4009699/4040100y + 101/20100. \end{cases} \\ \Gamma': & \begin{cases} G'_1 = y^3 - y^2 - 101y + 201, \\ G'_2 = x + y. \end{cases} \\ \Gamma'': & \begin{cases} G''_1 = y^4 + 2030200/101y^3 - 1030000/101y^2 - 204000000/101y + 400000000/101, \\ G''_2 = x + 101/400000000y^3 + 2563/500000y^2 + 40501/40000y - 3/200. \end{cases} \end{aligned}$$

当然、 G_1, G'_1, G''_1 の根も下記のように大きく異なってくる。

$$\begin{aligned} G_1: & [2.0530\cdots, 9.7043\cdots, -10.242\cdots, 19798.4\cdots], \\ G'_1: & [2.0219\cdots, 9.4205\cdots, -10.447\cdots], \\ G''_1: & [2.0224\cdots, 9.1390\cdots, -10.659\cdots, -20101.4\cdots]. \end{aligned}$$

第四番目の解 (Φ' の第四番目の解は無限の彼方) の違いには驚くばかりである。

図 1 : 多項式 F_1, F_2 のグラフ (横軸は x 座標、縦軸は y 座標)

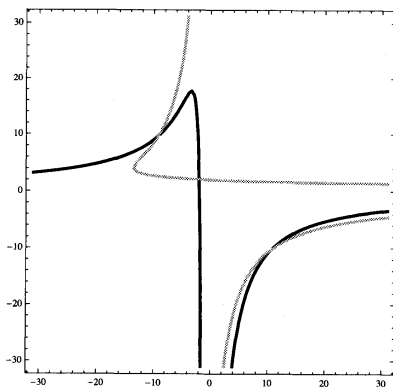


図 1a ($-30 \leq x, y \leq 30$)

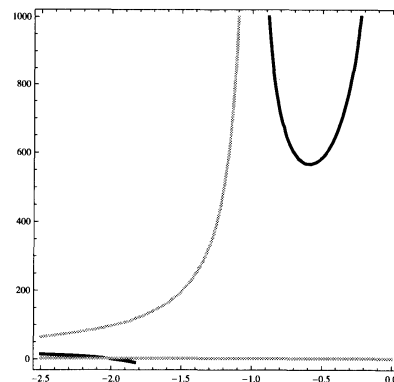


図 1b ($-2.5 \leq x \leq 0$)

黒線は F_1 を、灰線は F_2 を示している。図 1a は $-30 \leq x, y \leq 30$ の領域を図示し、三つの解が見える。図 1b は $-2.5 \leq x \leq 0$ で $0 \leq y \leq 1000$ の非常に細い領域を図示している。 y 軸左 $y \gtrsim 600$ の非常に細い領域に F_1 のグラフが現れることを示し、それが $y \approx 19800$ で F_2 のグラフと交わるように見える。なお、系 Φ' では、その細い領域に F'_2 のグラフが現れず、系 Φ'' では $y \lesssim -600$ の領域に F''_2 のグラフが現れる。□

連立代数方程式の解を最も明快に示すイデアル基底は辞書式順序でのグレブナー基底である。グレブナー基底が入力多項式の係数の摂動でどのように変化するかは、Weispfenning による総括的グレブナー基底 (comprehensive Gröbner basis) 論で説明されている [13] :

事実 入力多項式の係数はパラメータで、パラメータは任意の数値をとるとみなすとき、得られるグレブナー基底はパラメータの値により種々に変化するが、変化するの基底計算途中の多項式の主係数が0となり得る場合のみである。

逆に言えば、入力多項式の係数を微小摂動させても、グレブナー基底の計算途中において多項式の主係数が0にならなければ、計算結果のグレブナー基底の多項式の主項が変わることはない。上述のように、辞書式順序でのグレブナー基底と、特に主項の大きさは連立代数方程式の解を大きく規定する。したがって、次の定理が得られる。

定理3 (証明は上述のとおり) Φ の辞書式順序のグレブナー基底の計算で、微小主項の多項式が現れることは、 Φ が微小主項型の悪条件系であるための必要条件である。 $\square$

4.2 近似特異型悪条件連立代数方程式の良条件化

悪条件連立代数方程式のうち、近接解型のものは多くの研究者により研究されてきた。微小主項型のものは、数値解法で直接解くにはあまりに条件が悪すぎるであろう。実際的な解法としては、辞書式順序のグレブナー基底を各係数の精度に注意しながら計算するのがよいだろう。本節では近似特異型のものに対する良条件化の方法を提案する。ここで、良条件化とは数値解法で安定かつ効率的に解ける系に変換することである。

近似特異型のイデアルにおいては (3.4) に示した近似線形従属関係が存在するが、それは分っているとする、ただし、 $A_i \neq 0$ とする。近似特異系において系の特異化を妨げているのは (3.4) の右辺の δF ゆえ、 δF が大きな役割を果たすように系を変換すれば悪条件性は減少すると期待できる。そこで、本稿では次の良条件化を提案する。

$$\Phi = \{F_1, \dots, F_i, \dots, F_n\} \implies \Phi' = \{F_1, \dots, \delta F, \dots, F_n\}. \quad (4.7)$$

定理4 $\text{variety}(\Phi) \subseteq \text{variety}(\Phi')$ が成立する。

証明 代数多様体の定義より、 $\text{variety}(\Phi') = \text{variety}(\{F_1, \dots, A_1 F_1 + \dots + A_n F_n, \dots, F_n\}) = \text{variety}(\{F_1, \dots, A_i F_i, \dots, F_n\}) = \text{variety}(\Phi) \cup \text{variety}(\{F_1, \dots, A_i, \dots, F_n\})$ 。これ式から直ちに定理が得られる。 $\square$

注釈2 近似特異系がすべて数値計算で悪条件であるわけではない。悪条件となるのは解が特異系の近傍にある場合のみである。この場合、多変数ニュートン法ではヤコビアン行列が近似特異になる。しかしながら、次節の例が示すようにニュートン法の動きは複雑であり、さらなる研究が必要である。 $\square$

注釈3 A_i が定数でないとき Φ' は余分な“解”を含むので、最後に Φ' の各解を Φ に代入して余分な“解”を除去する必要がある。なお、系 Φ' が良条件であるとは限らない。上記とは別の近似線形従属関係 $A'_1 F_1 + \dots + A'_n F_n = \delta F'$, $A'_j \neq 0$ が存在するときがそうである。その場合には、 F_i と F_j をそれぞれ δF と $\delta F'$ で置き換えればよい。 $\square$

注釈4 (3.4) の δF はノルムが ε に減少しているが、浮動小数係数の場合、それは δF の計算で $1/\varepsilon$ の大きな桁落ちが起きていることを意味する。すなわち、 δF の係数の精度はそれだけ低下している。 $\square$

4.3 悪条件連立代数方程式の数値実験

本節では、3変数の簡単な連立代数方程式に対し、代表的な数値解法である ニュートン法 を適用して、悪条件性を確認するとともに良条件化の効果を検証する。

実験では、ニュートン法の逐次計算を二つの段階に分割して検討した：解とは無関係の初期値から粗い近似解への収束である 大域収束 と、粗い近似解から精度良い解への収束である 局所収束 である。大域収束は、初期値を例えば半径5の球面上にランダムに選び、(4.2) で決まる $|\delta_1|, \dots, |\delta_n|$ が全て 0.001 未満になるまで逐次近似を行う。局所収束については、初期値を解を中心とする半径 0.01 の球面上に選び $|\delta_1|, \dots, |\delta_n| < 10^{-10}$ が達成されるまで逐次近似を行った。局所収束に関する実験の詳細は省き結果を言うと、テストした全ての例でニュートン法は 4～5 回の反復で収束したが（ニュートン法は解の近傍で 2 次収束する）、近似線形従属関係を用いる良条件化は反復回数を 3～4 回に減少させる程度であった。したがって、局所収束に関しては良条件化はほんの少しの効果しかない。一方、大域収束性はニュートン法の最大の課題である。実際、近似特異系では全ての解への大域収束が如何に困難であるか、下記の例を見れば明白に分るだろう。

例 3 $\Phi = \{F_1 = 0, F_2 = 0, F_3 = 0\}$ を考える（8 個の小系に分割しないで計算する）。

$$\begin{cases} F_1 = (2y + x - z) * (z^2 + y^2 + x^2 - 1003/1000), \\ F_2 = (2x + z - y) * (z^2 + y^2 + x^2 - 1002/1000), \\ F_3 = (2z + y - x) * (z^2 + y^2 + x^2 - 1001/1000). \end{cases} \quad (4.8)$$

系は、トリビアルな解 $(z, y, x) = (0, 0, 0)$ 以外に、次の 6 個の実解を持つ。

$$\begin{aligned} \text{解 } 1_+ &= (0.16928 \dots, -0.84642 \dots, -0.50785 \dots), & \text{解 } 1_- &= -\text{解 } 1_+, \\ \text{解 } 2_+ &= (0.50759 \dots, -0.16919 \dots, 0.84599 \dots), & \text{解 } 2_- &= -\text{解 } 2_+, \\ \text{解 } 3_+ &= (0.84557 \dots, 0.50734 \dots, -0.16911 \dots), & \text{解 } 3_- &= -\text{解 } 3_+. \end{aligned} \quad (4.9)$$

$\Phi_1 = \{F_{23}=0, F_2=0, F_3=0\}$, $\Phi_2 = \{F_1=0, F_{31}=0, F_3=0\}$, $\Phi_3 = \{F_1=0, F_2=0, F_{12}=0\}$ を考える。ここで、 F_{12}, F_{23}, F_{31} は次の三つの近似線形従属関係である。

$$\begin{aligned} F_{12} &= 1000((2x + z - y) * F_1 - (2y + x - z) * F_2), \\ F_{23} &= 1000((2z + y - x) * F_2 - (2x + z - y) * F_3), \\ F_{31} &= 1000((2y + x - z) * F_3 - (2z + y - x) * F_1). \end{aligned} \quad (4.10)$$

次表は系 Φ と Φ_1, Φ_2, Φ_3 を、初期値を半径 2 の実球面上にランダムに生成し、収束条件を $\varepsilon = 0.001$ として、多変数ニュートン法で求解したとき、各根に収束する割合 (%) を示す。サンプル数は Φ が 10000、他が 200 で、13～15 回の反復ですべて収束した。

系	(0)	解 1 ₊	解 1 ₋	解 2 ₊	解 2 ₋	解 3 ₊	解 3 ₋
Φ		49.0	50.6	0.2	0.2		
Φ_1		48.0	52.0				
Φ_2				50.0	50.0		
Φ_3						43.0	57.0

表は、通常のニュートン法では解 $3_{\pm}$ は非常に見つかり難いが、 $\Phi_{(1,2,3)}$ に変換することにより、原点を除く全ての解が容易に見つかることを示している。ここで、 Φ_1, Φ_2, Φ_3 はいずれも無限個の解を持つことに注意されたい。したがって、 ε を非常に小さくして計算すればどこに収束しても不思議ではない。近似特異型の系の場合、本稿の“良条件化”が如何に“常識外れ”であるか分るだろう。□

例 4 $\Phi = \{F_1 = 0, F_2 = 0, F_3 = 0\}$ を次式で与える。

$$\begin{cases} F_1 = (z^2 + 2y + z) * (y^2 + x^2 - y + x - 3) - (y - z)/1000, \\ F_2 = (z^2 + 2x + z) * (y^2 + x^2 - y + x - 3) - (z - x)/1000, \\ F_3 = (z^2 + 2y - x) * (y^2 + x^2 - y + x - 3) - (x + y)/1000. \end{cases} \quad (4.11)$$

系は $(0, 0, 0)$ 以外の実解として次の 7 個を持つ（複素根は考えない）。因子 $y^2 + x^2 - y + x - 3$ は、解 1 では 0.016、解 5 では -1.01 となるが、他の解では ± 0.001 程度である。

$$\begin{aligned} \text{解 } 0_+ &= (0.0, 2.30291 \dots, 0.0), & \text{解 } 0_- &= (0.0, -1.30291 \dots, 0.0), \\ \text{解 } 1 &= (1.12415 \dots, -1.26820 \dots, -1.12415 \dots), \\ \text{解 } 2 &= (-1.12128 \dots, -0.43300 \dots, 1.12128 \dots), \\ \text{解 } 3 &= (-1.95758 \dots, -1.27737 \dots, 0.08303 \dots), \\ \text{解 } 4 &= (0.79717 \dots, -0.21182 \dots, -2.22982 \dots), \\ \text{解 } 5 &= (0.99802 \dots, -0.99605 \dots, -0.99802 \dots). \end{aligned} \quad (4.12)$$

F_{12}, F_{23}, F_{31} を例 3 のように定義し、系 Φ 以外に、次の 6 個の系を考える。

$$\begin{aligned} \Phi_1 : \{F_{23}=0, F_2=0, F_3=0\}, & \quad \Phi_2 : \{F_1=0, F_{31}=0, F_3=0\}, & \quad \Phi_3 : \{F_1=0, F_2=0, F_{12}=0\}, \\ \Phi_4 : \{F_1=0, F_{12}=0, F_{31}=0\}, & \quad \Phi_5 : \{F_{12}=0, F_2=0, F_{23}=0\}, & \quad \Phi_6 : \{F_{31}=0, F_{23}=0, F_3=0\}. \end{aligned}$$

次表は系 Φ と $\Phi_1 \sim \Phi_6$ を、初期値を半径 5 の実球面上にランダムに生成し、収束条件を $\varepsilon = 0.001$ として、多変数ニュートン法で求解したとき、各根に収束する割合 (%) を示す。サンプル数は Φ が 10000、他が 200 である。表中、解 0 は解 0_+ と解 0_- の割合の和を、nonS は解以外へ収束した割合を、nonC は収束しなかった割合を表す。

系	(0)	解 0	解 1	解 2	解 3	解 4	解 5	nonS	nonC
Φ		55.2	40.4	2.2	0.5	.01		0.0	7.5
Φ_1					3.5			92.0	4.5
Φ_2		61.5	9.5	2.5			1.5	23.5	2.5
Φ_3	1.5	11.0	10.5				6.0	26.5	44.5
Φ_4	2.0	49.0	4.5	2.5	1.0	2.5	0.5	37.5	0.5
Φ_5		26.5	11.5	36.0	1.5	5.5	0.5	17.5	1.0
Φ_6	1.0	51.5	2.0	2.0	8.0	8.5	1.0	25.0	1.0

本例においても、いくつかの解は通常のニュートン法では極めて求め難いが、近似線形従属関係を利用すれば難無く計算できる。なお、余計な“解”として頻繁に現れるのは $(-3.0, -3.0, -3.0)$, $(-3.0, -3.0, 3.0)$ 等で、それぞれ因子 $(z^2 + 2y + z)$, $(z^2 + 2y - x)$ 等を近似ゼロにする。□

5 近似代数幾何に向けて

多項式の近似 GCD や近似因数分解は、既約多項式が係数の微小摂動で可約になる場合にのみ有用であり（ある大きさ以下の摂動では可約にならない場合もあるが）、その場合には既存の厳密代数では決して得られない情報が得られる。同様に、近似イデアルでは、近似線形従属関係が要素として含まれる場合にのみ興味深い情報が得られる。近似特異系は近似イデアルに典型的な概念の一つであり、それを使うことにより厳密代数では決して得られない多くの有用な情報が得られるであろう。

悪条件連立代数方程式の数値実験をする前は、近似特異系はニュートン法の局所収束性を著しく弱めると予想していた。実験してみて、ニュートン法の局所収束性の良さに感心するとともに、近似線形従属関係が大域収束性を大きく改善することに驚いた。そして、近似特異系が定める代数多様体は近似代数の観点からは実に興味深い対象であると思うようになった。図 1 中の曲線は非常に興味深い振舞いをするが、そのような複雑な代数曲線や曲面も近似特異系や近似グレブナー基底の観点から捉えると分り易い。どうやら、近似代数幾何と呼ぶべき未開の分野が眼前に広がっていそうである。

参 考 文 献

- [1] D. Cox, J. Little and D. O'Shea. *Ideals, Varieties, and Algorithms*. Springer-Verlag New York, 1997.
- [2] S. Fortune: Polynomial root finding using iterated eigenvalue computation. *Proceedings of ISSAC2001 (Intn'l Symposium on Symbolic and Algebraic Computation)*, 121-128, ACM Press, 2001.
- [3] K. Nagasaka. A Study on Gröbner basis with inexact input. *Proceedings of CASC2009 (Computer Algebra in Scientific Computing): Springer LNCS 5743*, 248-258, 2009.
- [4] M. Ochi, M.T. Noda and T. Sasaki: Approximate greatest common divisor of multivariate polynomials and its application to ill-conditioned system of ... J. Inf. Proces., **14**, 292-300, 1991.
- [5] T. Sasaki: Approximately singular multivariate polynomials. *Proceedings of CASC 2004 (Computer Algebra in Scientific Computing)*, July 2004, St. Petersburg, Russia, 399-407, 2004.
- [6] T. Sasaki: A subresultant-like theory for Buchberger's procedure. Preprint of Univ. Tsukuba, 2010.
- [7] T. Sasaki: A theory and algorithm of approximate Gröbner bases. *Proceedings of SYNACS2011 (Symbolic and Numeric Algorithms for Scientific Computing)*, IEEE Computing Society, 23-30, 2012.
- [8] T. Sasaki and F. Kako. Computing floating-point Gröbner base stably. *Proceedings of SNC2007 (Symbolic Numeric Computation)*, 180-189, London, Canada, 2007.
- [9] T. Sasaki and F. Kako. Term cancellations in computing floating-point Gröbner bases. *Proceedings of CASC2010 (Computer Algebra in Scientific Computing): Springer LNCS 6244*, 220-231, 2010.
- [10] K. Shirayanagi. An algorithm to compute floating-point Gröbner bases. *Mathematical Computation with Maple V. Ideas and Applications*, Birkhäuser, 95-106, 1993.
- [11] T. Sasaki and M.T. Noda: Approximate square-free decomposition and root-finding of ill-conditioned algebraic equations. J. Inf. Proces., **12**, 159-168, 1989.
- [12] C. Traverso and A. Zanon. Numerical stability and stabilization of Gröbner basis computation. *Proceedings of ISSAC2002 (Intn'l Symposium on Symbolic and Algebraic Computation)*, 262-269, ACM Press, 2002.
- [13] V. Weispfenning: Comprehensive Gröbner bases. J. Symb. Comp. **14**, 1-29, 1992.