

数式処理と数値計算の融合

関川 浩

日本電信電話(株) NTTコミュニケーション科学基礎研究所

数式処理と数値計算双方の長所を取り入れた、信頼性が高く効率のよい計算方法を実現する技術である数値数式融合計算を紹介する。数式処理の長所は、数式の係数などの入力値が誤差を含まなければ、得られる結果が常に正確であるという点である。しかし、一方で、浮動小数点計算を利用する数値計算に比べ、速度が遅く、多量のメモリを必要とする、入力値が誤差を含むときには適切な出力が得られない場合がある、などの短所がある。数値数式融合計算は、数式処理と数値計算をアルゴリズムのレベルで融合して両者の長所を活かそうとする計算技術であり、近年、制御系を始めとするさまざまな分野の設計などへも適用されるようになってきた。

計算方式	効率	信頼性	融通性
数値計算	高	保証が必要	高
数式処理	低	高	低

表-1 数値計算と数式処理の比較

の一例として、2つの多項式

$$f_1(x) = x^8 + x^6 - 3x^4 - 3x^3 + 8x^2 + 2x - 5,$$

$$f_2(x) = 3x^6 + 5x^4 - 4x^2 - 9x - 21$$

の最大公約多項式 $\gcd(f_1, f_2)$ を Euclid の互除法により求める計算を示す。ただし、 f_i は f_{i-2} を f_{i-1} で割った剰余である。

$$f_3(x) = -\frac{5}{9}x^4 + \frac{127}{9}x^2 - \frac{29}{3},$$

$$f_4(x) = \frac{50157}{25}x^2 - 9x - \frac{35847}{25},$$

$$f_5(x) = \frac{93060801700}{1557792607653}x + \frac{23315940650}{173088067517},$$

$$f_6(x) = \frac{761030000733847895048691}{86603128130467228900},$$

$$f_7(x) = 0.$$

剰余が0となる直前の f_6 が定数であることにより、 f_1 と f_2 は互いに素（最大公約多項式が定数）であることがいえるが、計算過程で係数が急激に膨張していることが分かる。

数値計算と数式処理の特徴を表-1にまとめる。両者の長所と短所は、それぞれ相補的な関係になっていることが分かる。したがって、両者の長所をうまく組み合わせることができれば、理想的な計算方法が実現できる。

コンピュータによる計算では、数値計算の方が歴史が古く、また、計算の効率面から、科学技術計算には主に数値計算が用いられてきた。しかし、最近のコンピュータの能力を考えると、数式処理も実用段階に入ってきたといえる。たとえば、変数やパラメータを残したまま数式を扱えること、数値計算が苦手とする、制約条件が非線形、非凸な最適化問題などへの適用が可能であることから、制御系を始めとするさまざまな分野の設計などへも適用

数値計算と数式処理

コンピュータによる数値や数式の計算には、数値計算と数式処理という2つの種類がある。たとえば、 $x^3 - 2 = 0$ という代数方程式が与えられたとき、数値計算では、根の近似値 $-0.6299605249 - 1.091123636 \cdot i$ 、 $-0.6299605249 + 1.091123636 \cdot i$ 、 1.259921050 を出力する。これに対し、数式処理では、実根の個数や、入力された区間内にある根の個数を出力する。

数値計算は、近似計算（主に浮動小数点計算）を用い、適当な初期値から始めて、近似解の精度を次第に上げていくことを特徴とする。したがって、入力される数式の係数などが近似値であっても処理ができ、計算の効率がよい上、計算を途中で打ち切ってもある程度意味のある結果が得られるといった融通性がある。しかし、誤差を伴うので計算結果の信頼性が問題となる。

数式処理（計算機代数あるいは計算代数とも呼ばれる）は、浮動小数点計算のような近似計算は用いず正確に計算を行うこと、有限ステップで終了する代数的な計算を行うこと、変数記号はそのままとすることなどが特徴である。したがって、結果は信頼できるが、入力多項式の係数は正確なものに限られ、最後まで計算しないと意味のある結果が得られないといった融通性に欠ける面がある。さらに、計算過程で多項式の係数の大きさが膨張するため計算が非効率になるなどの問題もある。係数膨張

```

入力: X
Y := 3X - 1
if Y=0 then return 0
else return 1

```

図-1 不安定なアルゴリズムの例

されるようになってきた¹⁾。

ただし、数式処理を実際の問題に適用するためには、いくつかの注意が必要である。効率性の問題のほか、誤差のある入力を与えると不安定な挙動を示すため、対策が必須となる。そのため、数式処理に数値計算を取り入れることにより両者の長所を合わせ持った計算方式を構築しようとする、数値数式融合計算の研究が始まった。

以下、まず、数値数式融合計算とは何かを説明し、次いで、多項式の零点を計算するという基本的な問題に数値数式融合計算を適用した例を述べる。さらに、数値数式融合計算に役立つ汎用的技術として、数式処理による最適化手法 QE と、数値最適化の手法 SDP 緩和を紹介したあと、最後に、今後の課題について述べる。

なお、本稿では、実数全体の集合を \mathbb{R} 、複素数全体の集合を \mathbb{C} と書くことにする。

数値数式融合計算とは

数値数式融合計算の研究には以下の2つの方向がある。

- 数式処理に数値計算を組み込むことにより、数式処理の長所を残しつつ、計算効率を高めようとする研究。
- 与えられた数式の係数が誤差を含む場合でも、破綻せず実用上意味のある出力を返すアルゴリズムの研究。

本稿では、前者を「効率を追求する数値数式融合計算」、後者を「誤差を許容する数値数式融合計算」と呼ぶことにする。

数式処理を数値計算の前処理として利用するといった研究は1970年代頃より存在したものの、アルゴリズムのレベルでの両者の融合は、1988年頃に佐々木が提唱した近似代数³⁾あたりが始まりのようである。その後、最大公約多項式や因数分解の計算などの基本的な数式処理については、数式処理と数値計算を融合したアルゴリズムが研究された。さらに、効率を追求する数値数式融合計算の1つの枠組みとして、次節で簡単に紹介する安定化理論が白柳らにより1995年に提案された。また、最近では、シミュレーション技術、特にロバスト制御系設計への応用¹⁾など、実問題への応用も盛んである。このように数値数式融合計算は日本発の技術であるとも

いえるが、諸外国でも、1993年頃より数値数式融合計算の研究が行われるようになり、この分野に特化した教科書⁷⁾が2004年に出版され、研究成果の一部は、代表的な数式処理システムである Mathematica や Maple にも取り入れられている。また、1996年から不定期に開催されていた数値数式融合計算の国際ワークショップは、2005年より International Workshop on Symbolic-Numeric Computation という名称で2年に1回の定期開催となった(次回は京都で開催の予定である)。

数値数式融合計算は、数値数式ハイブリッド計算、近似代数などとも呼ばれる。英語では、SNC (Symbolic-Numeric Computation)、SNAP (Symbolic-Numeric Algebra for Polynomials)、approximate algebra などと訳されることが多い。NLA (Numerical Linear Algebra) にならって、NCA (Numerical Commutative Algebra) という提案もあるが、あまり使われていないようである。

●効率を追求する数値数式融合計算

最大公約多項式の計算例で示したように、数式処理には係数膨張のため計算効率が低下するという問題が付きまとう。この問題を解決するためには、個々の問題に特化した対処法のほか、入力された多項式の係数がすべて有理数の場合には、合同式を利用する手法(中国剰余定理や Hensel 構成を利用する手法)などが提案されている(佐々木らによる教科書⁴⁾の第I部などを参照のこと)。しかしながら、これらの方法は、無理数の係数が存在する場合には適用できない。そこで自然な発想として、浮動小数点計算を利用することが考えられる。ところが、実際には、数式処理に近似計算を持ち込むのは御法度とされた時期が長く続き、こうした数式処理と数値計算を融合する研究が始まったのはたかだか20年ほど前のことである。

御法度とされた理由は、数式処理アルゴリズム中で浮動小数点計算を利用すると、出力が不安定になるからである。例として、等号判定のみからなる図-1のアルゴリズムを考えよう(数式処理は正確な計算を用いるため、アルゴリズム中にしばしば等号判定が現れる)。入力が $1/3$ のとき、正確に計算すれば出力は 0 となる。しかし、10進の浮動小数点を用い、 $1/3$ を精度3桁で 0.333 と近似すると、 $Y = -0.001$ となり出力は 1 である。たとえ近似精度をいくら上げても出力は 1 のままであって 0 となることはない。このように、「近似精度をいくら上げて計算しても、出力が正解に収束しない」という不安定な状況が起こり得る(したがって、浮動小数点計算を利用する数値計算では通常、等号判定を用いない)。こ

の不安定性を解消するために、白柳と Sweedler は安定化理論を提案した。安定化理論では、単純な浮動小数点計算の代わりに区間計算^{☆1}を使用し、「ゼロを含んだ区間をただ一点ゼロのみからなる区間 $[0,0]$ に書き換える」という区間のゼロ書き換えを導入する。安定化理論を適用することにより、大部分の数式処理アルゴリズムの不安定性を解消できる。これについては、詳しくは白柳による解説⁶⁾ およびそこにある文献を参照されたい。

●誤差を許容する数値数式融合計算

数値数式融合計算のもう 1 つの研究の流れが入力誤差への対処である。入力が誤差を含む場合、たとえわずかな誤差であっても、出力がまったく違ってしまうという不安定な状況が生じ得る。たとえば、図 -1 のアルゴリズムで、2 行目の “ $3X-1$ ” を “ $2X-1$ ” に変えた例を考よう。入力が正確に 0.5 に等しいときは出力は 0 であるが、入力が誤差のため 0.5 からわずかでもずれると、出力は 1 となってしまふ。すなわち、このアルゴリズムは入力が 0.5 のところで不連続である。このように、誤差に起因する不安定性の問題を解決しなければならない。

実は、制御理論においては、数式処理よりも早く、誤差のある入力に対処する研究が行われてきた。例として、制御理論などの分野において重要な、多項式の安定性判定を取り上げる。これは、与えられた一変数多項式のすべての零点が複素開左半平面（実部が負である複素数全体の集合）に属するか否かを判定する問題である。多項式の係数が正確に分かっている場合には、すでに 19 世紀に判定法が発見されており、以下の定理が知られている。

定理 1 (Hurwitz (1895))

実係数一変数多項式 $f(x) = a_n x^n + \dots + a_1 x + a_0$ ($a_n > 0$) に対し、 $n \times n$ 行列 H を以下で定義する。

$$H = \begin{pmatrix} a_{n-1} & a_{n-3} & a_{n-5} & \dots & 0 \\ a_n & a_{n-2} & a_{n-4} & \dots & 0 \\ 0 & a_{n-1} & a_{n-3} & \dots & \\ 0 & a_n & a_{n-2} & \dots & \\ 0 & 0 & a_{n-1} & \dots & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & a_4 & a_2 & a_0 \end{pmatrix}$$

また、 Δ_j を、 H の最初の j 行、 j 列からなる $j \times j$ 行列に対応する行列式とする。このとき、 $f(x)$ が安定である必要十分条件は、 $j=1, \dots, n$ に対して $\Delta_j > 0$ が成り立つことである。

☆1 誤差を含む実数の間の計算を、誤差も包み込んだ区間の間の計算で置き換え、計算の結果を確実に含む区間を作り出すもの。複素数版もある。

しかしながら、実際のシステムでは係数 a_j には誤差が含まれているのが普通であり、定理 1 を適用することができない。すなわち、誤差のある場合は、 a_j の真の値が区間 $[l_j, h_j]$ ($l_j, h_j \in \mathbb{R}$, l_n と h_n は同符号) に含まれるとして、多項式の集合

$$F = \{a_n x^n + \dots + a_1 x + a_0 \mid l_j \leq a_j \leq h_j (j=1, \dots, n)\} \quad (1)$$

に属するすべての多項式が安定か否かを判定する必要がある。これについては、以下の定理が知られている。

定理 2 (Kharitonov (1978))

集合 F に属するすべての多項式が安定である必要十分条件は、以下の 4 つの多項式 $K_j(x)$ ($j=1, 2, 3, 4$) が安定であることである。

$$\begin{aligned} K_1(x) &= l_0 + l_1 x + h_2 x^2 + h_3 x^3 + l_4 x^4 + l_5 x^5 \\ &\quad + h_6 x^6 + \dots, \\ K_2(x) &= h_0 + l_1 x + l_2 x^2 + h_3 x^3 + h_4 x^4 + l_5 x^5 \\ &\quad + l_6 x^6 + \dots, \\ K_3(x) &= h_0 + h_1 x + l_2 x^2 + l_3 x^3 + h_4 x^4 + h_5 x^5 \\ &\quad + l_6 x^6 + \dots, \\ K_4(x) &= l_0 + h_1 x + h_2 x^2 + l_3 x^3 + l_4 x^4 + h_5 x^5 \\ &\quad + h_6 x^6 + \dots. \end{aligned}$$

係数が誤差を含む多項式の安定性判定問題は、係数に誤差を含まない無限個の多項式の安定性判定問題に相当する。定理 2 は、係数に誤差を含まない多項式の安定性判定問題を自然に係数が誤差を含む場合に拡張した問題が効率よく解ける (4 個の多項式を調べるだけで無限個の多項式の安定性が判定できる) ことを主張している。定理 2 の証明および関連する話題については、山本による解説⁸⁾などを参照されたい。

しかし、一般の場合、多項式の安定性判定問題とは異なり、誤差を含まない問題を誤差を含む問題へ自然に拡張できたり、拡張した問題が効率よく解けるとは限らない。たとえば、多項式の零点判定問題「多項式 $f(x) = a_n x^n + \dots + a_1 x + a_0$ が c を零点とするか」を考えよう。 f の係数が正確に分かっているときには $f(c) = 0$ かどうか調べるだけで問題は解決する。しかし、 f の係数が誤差を含んでいる場合、式 (1) と同じように多項式の集合 F を考えると、特別な場合を除き、「 F に属するすべての \tilde{f} に対し $\tilde{f}(c) = 0$ 」は成立しない。すなわち、自然に拡張した問題は、ほとんど意味のないものになってしまう。

以上 2 つの例は判定問題であったが、以下に、構成問題 (多項式の集合から、新しい多項式を計算する問題) の例を取り上げる。2 つの実係数一変数多項式 $f = x^2 - a$ と $g = x - 2$ の最大公約多項式 $\text{gcd}(f, g)$ を求める問題を

考えよう. a が正確に 4 と等しいとき, $\gcd(f, g) = x - 2$ である. 今, a は近似値であって, たかだか $\epsilon > 0$ の誤差があり, 真の値は $|a - 4| \leq \epsilon$ を満たすものと仮定する. このとき, 式 (1) と同じように, 単一の多項式 f ではなく, 多項式の集合 $F = \{x^2 - a \mid |a - 4| \leq \epsilon\}$ を考える. すると, 誤差の限界 ϵ がどれほど小さくても, それが正である限り, F に属する 2 つの多項式 $f_1 = x^2 - 4$, $f_2 = x^2 - 4 - \epsilon$ に対し, $\gcd(f_1, g) = x - 2$ であり, $\gcd(f_2, g) = 1$ である. すなわち, 最大公約多項式は係数の変化に対して不連続であり, 係数に誤差を含む多項式に対する最大公約多項式は, 厳密に言えば定義できない.

しかし, 誤差のある場合へ問題が自然に拡張できない場合でも, 応用上, 何らかの意味のある結果を求める必要が出てくることもある. このようなときには, 問題の解釈を適当に変更した上で, 拡張した問題を設定することになる.

先に取り上げた多項式の零点判定の問題の場合, もし, 意味のある結果を求めるとすれば, 誤差範囲内で f と区別できない多項式からなる集合を F として, ある多項式 $\tilde{f} \in F$ に対して $\tilde{f}(c) = 0$ ならば f は c を零点として持つ, といった解釈が妥当であろう. 実際, 数値計算では, 誤差を含む対象 u に対し, 誤差範囲内で u と区別できない v が性質 P を持つならば u は性質 P を持つとする, という解釈がよく使われる.

一方, 最大公約多項式を求める問題は, 係数に誤差を含む 2 つの多項式 f, g に対し, 誤差範囲内で f, g と区別できない多項式の集合を F, G として, たとえば, 「 $\gcd(\tilde{f}, \tilde{g})$ の次数が最大となるような $\tilde{f} \in F$ と $\tilde{g} \in G$ を求める」といった問題に置き換えることが考えられる.

多項式 f と区別できない多項式の集合 F を記述するためには多項式ノルムがよく利用される. $1 \leq p \leq \infty$ に対し, 多項式 f の l^p ノルム $\|f\|_p$ を, 係数ベクトルの l^p ノルム

$$(|a_0|^p + \dots + |a_n|^p)^{1/p} \quad (2)$$

($p = \infty$ のときは, 式 (2) で $p \rightarrow \infty$ とした極限 $\max\{|a_0|, \dots, |a_n|\}$) で定義する. ただし, 多項式 $f(x) = a_n x^n + \dots + a_1 x + a_0$ に対し, f の係数ベクトルとは (a_0, \dots, a_n) のことである. 多項式 f の次数を $\deg(f)$ で表すものとし, 適当な p (よく使われるのは $1, 2, \infty$) を用いて, 多項式の集合 F を,

$$\{\tilde{f} \mid \|\tilde{f} - f\|_p \leq \epsilon, \deg(\tilde{f}) \leq \deg(f)\}$$

などと書くことが多い. なお, $w_j > 0$ ($j = 0, \dots, n$) とし, 重みつき l^p ノルム $(w_0 |a_0|^p + \dots + w_n |a_n|^p)^{1/p}$ ($p = \infty$ のときは $\max\{w_0 |a_0|, \dots, w_n |a_n|\}$) を用いたり, 一部の係数を固定することもよく行われ, いずれも以下と類似の結果が成り立つ.

ここで, P を有限個の多項式についての性質 (たとえば, 1 つの多項式に対する安定性) で, 通常の数式処理で扱えるものとする. 誤差のない場合の問題「有限個の多項式 f_1, \dots, f_k は性質 P を満たすか」が, 誤差のある場合, 自然な拡張「任意の $\tilde{f}_j \in F_j$ ($j = 1, \dots, k$) に対して, $\tilde{f}_1, \dots, \tilde{f}_k$ は P を満たすか」以外に, どのように解釈が変更され, 拡張されるか, 列挙してみる. ただし, F_j は誤差範囲内で f_j と区別できない多項式からなる集合を表す.

- P を満たす $\tilde{f}_1 \in F_1, \dots, \tilde{f}_k \in F_k$ は存在するか.
- f_1, \dots, f_k が P を満たさないとき, P を満たす $\tilde{f}_1 \in F_1, \dots, \tilde{f}_k \in F_k$ で, $\{\tilde{f}_1, \dots, \tilde{f}_k\}$ が $\{f_1, \dots, f_k\}$ に一番近いものを求めよ (多項式の集合間の距離は, 多項式ノルムを使って定義する).

P はパラメータを含んでいてもよい. パラメータを t としたとき, 以下のような問題 (最適化問題) も考えられる.

- 任意の $\tilde{f}_j \in F_j$ ($j = 1, \dots, k$) に対して, $\tilde{f}_1, \dots, \tilde{f}_k$ が P を満たすような t の最大値 (最小値) を求めよ.
- P を満たす $\tilde{f}_1 \in F_1, \dots, \tilde{f}_k \in F_k$ が存在するような t の最大値 (最小値) および, そのときの $\tilde{f}_1, \dots, \tilde{f}_k$ を求めよ.

たとえば, P が最大公約多項式にかかわる性質の場合には以下のような問題が考えられる.

問題 1 f_1 と f_2 が互いに素なとき, 最大公約多項式が 1 次以上となる $\tilde{f}_1 \in F_1, \tilde{f}_2 \in F_2$ であって, $\max\{\|\tilde{f}_1 - f_1\|_\infty, \|\tilde{f}_2 - f_2\|_\infty\}$ が最小となるものを求めよ (元の P は, 「最大公約多項式の次数は 1 以上」).

問題 2 最大公約多項式の次数が最大となるような $\tilde{f}_1 \in F_1$ と $\tilde{f}_2 \in F_2$ を求めよ (元の P は, 「最大公約多項式の次数は t 」).

問題 1, 2 は数式処理の範囲に収まる問題となっている. ただし, 問題 1, 2 を従来の数式処理のみで解こうとするのは, 厳密である反面, 融通性に欠ける, いわば硬い方法である.

まったく別の研究方向として, 本来, 正確な数値に対してのみ用いられる硬い代数的な計算を, 誤差を含む数値に対しても柔軟に適用しようとする, 柔らかい方法も研究されている. こちらについては, 佐々木らによる教科書⁴⁾ の第 I 部などを参照されたい.

数値数式融合計算の適用例

数値数式融合計算を実際に適用した例として, 一変数多項式 $f(x)$ の零点 ($f(x) = 0$ の根) に関する問題を取り上げる. 一変数多項式 $f(x) = a_n x^n + \dots + a_1 x + a_0$

$(a_n \neq 0)$ の零点の位置を決めることは、数値計算や数式処理において最も基本的な問題の1つである。数値計算では、Newton法を始めとする反復法を用いて零点の近似値を求めるのが普通である。一方、数式処理では、Sturmのアルゴリズムを代表例とする有限ステップで終了するアルゴリズムにより、入力された実の区間や複素の領域内に存在する零点の個数を求めるのが普通である。

前章で取り上げた零点判定の問題を、係数に誤差のある場合に拡張すると、たとえば、以下ようになる。

問題3 多項式 f , 集合 $D \subset \mathbb{C}$, 実数 $\epsilon > 0$ が与えられたとき, $\deg(\tilde{f}) \leq \deg(f)$, $\|\tilde{f}-f\|_p \leq \epsilon$ を満たし, D に零点をもつような多項式 \tilde{f} が存在するか?

問題4 問題3で \tilde{f} が存在するような最小の ϵ およびそのときの \tilde{f} を求めよ。

問題4に対する解答が分かれば問題3は解決することに注意。問題3は、「多項式 $f = a_n x^n + \dots + a_1 x + a_0$ が c を零点とするか」という問題において、 f の係数 a_j だけではなく、 c も誤差を含む場合であるとみなすことができる。また、問題3の否定は、「多項式 f , 集合 $D \subset \mathbb{C}$, 実数 $\epsilon > 0$ が与えられたとき, $\deg(\tilde{f}) \leq \deg(f)$ かつ $\|\tilde{f}-f\|_p \leq \epsilon$ を満たすすべての多項式 \tilde{f} のすべての零点が D の補集合に属するか」になるから、問題3は多項式の安定性判定と同種の問題ともいえる。したがって、この種の問題は制御理論でも扱われ、問題4は数値計算を用いた探索により解かれている。ただし、この場合、厳密には大域最小性を別途保証することが必要となる。のちほど、数式処理の技術を用いて問題4の最小値を確実に求める手法を紹介する。

●複素係数多項式の複素零点

最初に、 f, \tilde{f} が複素係数、すなわち、多項式の係数と係数の誤差がともに複素数の場合を考える。 v^T を列ベクトル v の転置 (複素共役は取らない), $\|\cdot\|$ を \mathbb{C} のノルムとする。 $\|\cdot\|$ の双対ノルム $\|\cdot\|^*$ を

$$\|v^T\|^* = \max_{u \neq 0} \frac{|v^T u|}{\|u\|} = \max_{\|u\|=1} |v^T u|$$

で定義する。 $\|u\| = 1$ となる u の集合は \mathbb{C}^n の有界閉集合だから、その上で連続な u の関数 $|v^T u|$ の最大値は確かに存在する。 $p, q (1 \leq p, q \leq \infty)$ が $1/p + 1/q = 1$ を満たし、 $\|\cdot\|$ が l^p ノルムのとき、 $\|\cdot\|^*$ は l^q ノルムとなる。

D が一点の場合、問題3は以下の定理により解決する。

定理3 2つの多項式

$$f(x) = a_n x^n + \dots + a_1 x + a_0,$$

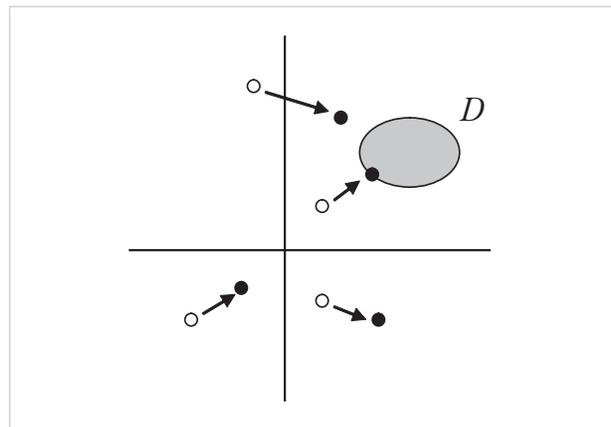


図-2 係数の変化による多項式の零点の変化 (白丸が f の零点, 黒丸が g の零点)

$$\tilde{f}(x) = f(x) + \Delta a_n x^n + \dots + \Delta a_1 x + \Delta a_0,$$

ただし, $a_j, \Delta a_j \in \mathbb{C} (j=0, \dots, n)$ に対し,

$$\mathbf{a}^T = (a_0, \dots, a_n),$$

$$\Delta \mathbf{a}^T = (\Delta a_0, \dots, \Delta a_n)$$

とする。このとき、 $c \in \mathbb{C}$ に対し、 $\mathbf{c}^T = (1, c, \dots, c^n)$

とすると、 $\tilde{f}(c) = (\mathbf{a} + \Delta \mathbf{a})^T \mathbf{c}$ が 0 ならば

$$\|\Delta \mathbf{a}^T\|^* \geq \frac{|f(c)|}{\|\mathbf{c}\|} \tag{3}$$

である。逆に、式(3)の等号を成り立たせる $\Delta \mathbf{a}$ で、 $\tilde{f}(c) = 0$ となるものが存在する。

定理3は、数値計算でよく知られている後退誤差解析の内容を線形代数のことで書き換えたものである。この定理は、二次以上の多項式の零点を求める問題は非線形だが、先に零点の位置を決めてから多項式の係数を求める問題は線形であることを利用して得られる。

今、 $D \subset \mathbb{C}$ を有界な閉領域 (すなわち、有界かつ連結な開集合の閉包) であって、その周の長さが有限であるものとする (典型例は、境界も含む円板や多角形の内部)。多項式の次数が一定なら、その零点は係数について連続に変化するので、 f が領域 D に零点を持たないとき、 f に一番近く D に零点を持つ多項式 g の少なくとも1つの零点は D の境界上に存在することになる (図-2)。多項式の次数が変化する場合でも、同じ結論が成り立つことが知られている。よって、境界上に不等式(3)を満たす点が存在するか否かを判定すれば、問題3の解答が得られる。 f のすべての係数が $b+ci$ (b, c は有理数、 b, c が浮動小数点数の場合も有理数と解釈できる) の形で、かつ、 D の境界が具体的に計算できる形で与えられていれば、この判定問題は従来の数式処理で扱える問題に帰着する。

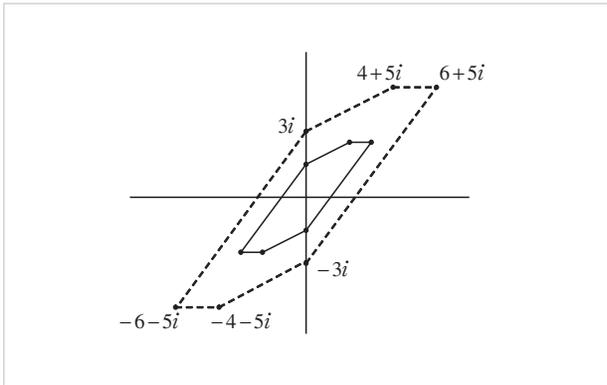


図-3 $E_\epsilon(c)$ の例 (実線およびその内部が $E_{0.5}(c)$, 破線およびその内部が $E_1(c)$)

●実係数多項式の複素零点

次に, f, \tilde{f} が実係数, $D \subset \mathbb{C}$ が有界な閉領域, かつ, その周の長さが有限のとき, 問題4について考えよう. 実係数は複素係数の特別な場合なので前節の結果が援用できると思われるかもしれないが, そうではない. なぜなら, 係数の誤差を実数に制限しているため, 問題3, 4で \tilde{f} の候補となる多項式の集合が複素係数の場合よりも小さくなるからである. この場合, 状況は複雑になるので, 例として, l^∞ ノルムを用いた場合についてのみ述べる⁵⁾.

まず, 実係数多項式 $f = a_n x^n + \dots + a_1 x + a_0$ ($a_n \neq 0$) と実数 $\epsilon \geq 0$ に対し, 次数が n 以下かつ l^∞ ノルムで f との距離が ϵ 以下である実係数多項式の集合

$$\{g \mid \|g - f\|_\infty \leq \epsilon, \deg(g) \leq n\}$$

を $F_\epsilon(x)$ と書くことにする. 複素数 c に対し,

$$F_\epsilon(c) = \{g(c) \mid g \in F_\epsilon(x)\}$$

とすると, $g(c) = 0$ となる多項式 g が $F_\epsilon(x)$ に属する必要十分条件は $0 \in F_\epsilon(c)$ である. 今, 実係数多項式の集合

$$\{g \mid \|g\|_\infty \leq \epsilon, \deg(g) \leq n\}$$

を $E_\epsilon(x)$ とすると, $F_\epsilon(x) = f(x) + E_\epsilon(x)$ と書け, 条件 $0 \in F_\epsilon(c)$ は $f(c) \in E_\epsilon(c)$ と同値となる. ここで, $E_\epsilon(c)$ は, 向かい合う辺が平行な凸多角形 (辺の数はたかだか $2n+2$. $2n+2$ は係数の数 $n+1$ の2倍) で囲まれた領域であり, 原点に関して対称であることに注意する.

図-3に $n=2, c=2+i$ のときの $E_\epsilon(c)$ を示す. 実線およびその内部が $E_{0.5}(c)$ であり, 破線およびその内部が $E_1(c)$ である. したがって, $g(c) = 0$ となる $g \in F_\epsilon(x)$ が存在するような ϵ の最小値は, $f(c)$ がちょうど $E_\epsilon(c)$ のいずれかの辺上に存在するような ϵ の値として求めることができる.

$E_\epsilon(c)$ は, 向かい合う平行な辺の組から決まる, たかだか $n+1$ 個の帯状領域の共通部分としても表現でき

る. 複素数の実部を x , 虚部を y と書くことにすると, 図-3に示した例の場合, 帯状領域は以下の3個である.

$$|y| \leq 5\epsilon, \quad |x-2y| \leq 6\epsilon, \quad |4x-3y| \leq 9\epsilon.$$

これらの不等式を同時に満たす ϵ の最小値が, 問題4で求めたい ϵ である. たとえば, $f(x) = 2x^2 - 3x + 5$ の場合を考えよう. $f(c) = 5 + 5i$ なので, $\epsilon = 1$ のとき, ちょうど $f(c)$ が $4 + 5i$ と $6 + 5i$ を結ぶ辺上に存在することが分かる. つまり, 集合 D がただ一点 $2+i$ のみからなるとき, 問題4の解は $\epsilon = 1$ である (なお, $\tilde{f}(x) = x^2 - 4x + 5$ となる).

ϵ の最小値は c の関数となるので $\Phi(c)$ と書くことにすると, 複素平面をいくつかの領域に分けたとき, $\Phi(c)$ は各領域上で c の実部と虚部の有理関数となることを示すことができる (領域が変わると有理関数も変わる). 前節に述べたのと同じ理由で, f が領域 D に零点を持たないとき, f に一番近く D に零点を持つ多項式の少なくとも1つの零点は D の境界上に存在することになる. よって, D の境界が具体的に計算できる形で与えられていれば, 境界上での Φ の最小値を求めることが可能となる.

数値数式融合計算に役立つ汎用技術

誤差を許容する数値数式融合計算の研究では, 最大公約多項式や因数分解など個別の問題ごとに, 特化した解決手法の工夫を行ってきた. 前章で取り上げた解決手法は, その典型例である. 本章では, 誤差を許容する数値数式融合計算に役立つ汎用技術を2つ, 簡単に紹介しておきたい.

1つは数式処理による最適化手法である限定記号消去 (Quantifier Elimination, 略称QE) である. QEとは, 多項式の等式, 不等式, 限定記号 (\forall, \exists), ブール演算 ($\wedge, \vee, \Rightarrow, \neg$ など) からなる一階述語論理式に対し, 等価で限定記号を含まない式を導く手法で, 入力式が真であるための限定記号のない変数の領域を出力する. たとえば, 入力式 $\forall x(x^2 + bx + c > 0)$ に対し, 限定記号を含まない等価な式 $b^2 - 4c < 0$ を出力する.

本稿で取り上げたような問題はQEの問題として扱える. ただし, 計算効率を考えると効率を追求する数値数式融合計算の利用なども必要となる. QEについては, 穴井による解説¹⁾ およびそこにある参考文献を参照されたい.

もう1つ, 数値数式融合計算に役立つ汎用技術として, 数値最適化で使われているSDP緩和がある. 本稿で述べたような, 数値数式融合計算にかかわる最適化問題は, 多項式最適化問題, すなわち, p, q_1, \dots, q_m を n 変数実

多項式としたとき, $q_1(c) \geq 0, \dots, q_m(c) \geq 0$ ($c \in \mathbb{R}^d$) なる制約条件の下で, $p(c)$ の最小値を求める問題ととらえることができる. なお, 一般に制約条件は非線形, 非凸である.

近年, 多項式制約問題に対して数値最適化の手法である SDP 緩和 (SDP は半正定値計画法 semidefinite programming の略) を取り入れた手法が提案された. それを利用して数値数式融合計算に現れる問題を解こうとするのは自然な発想である. 数値計算を用いるため解の保証が必要であり, また, 緩和した問題が大規模になるという欠点があるが, それを克服しようとする研究も始まっている²⁾.

おわりに

本稿で触れたもののほか, 数式処理の種々の基本的な問題が数値数式融合計算の枠組みで研究されている. 連立代数方程式の解法を通じて実際の工学問題 (制御, シミュレーション, 最適化計算など) に幅広い応用のあるグレブナ基底^{☆2}もその一例である. グレブナ基底は, ここ二十数年の数式処理発展の契機となった基本的かつ重要な対象であるので, この研究が進展すれば, 数値数式融合計算に大きな影響を与えることになるであろう. しかし, 特に誤差を許容する数値数式融合計算についてはまだ満足のいく状況とはいえない.

数値数式融合計算の研究が発展することにより, 信頼性が高く効率的な計算方式が確立されることを期待している.

^{☆2}多項式環のイデアルの基底として 1960 年代に Buchberger が発見し, 計算法も示した. 代数幾何などの現代数学とも深く関係する.

参考文献

- 1) 穴井宏和: 数値/数式ハイブリッド計算に基づくロバスト最適化プラットフォーム, 情報処理, Vol.48, No.10, pp.1096-1102 (Oct. 2007).
- 2) Kaltofen, E., Li, B., Yang, Z. and Zhi, L.: Exact Certification of Global Optimality of Approximate Factorizations Via Rationalizing Sums-Of-Squares with Floating Point Scalars, *Proc. International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation (ISSAC2008)*, pp.155-163 (2008).
- 3) 佐々木建昭: 近似的代数計算, 京都大学数理解析研究所講究録 676, pp.307-319 (1988).
- 4) 佐々木建昭, 今井 浩, 浅野孝夫, 杉原厚吉: 計算代数と計算幾何, 岩波講座応用数学, 岩波書店(1993).
- 5) Sekigawa, H.: The Nearest Polynomial with a Zero in a Given Domain from a Geometrical Viewpoint, *Proc. International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation (ISSAC2008)*, pp.287-294 (2008).
- 6) 白柳 潔: 不安定なアルゴリズムを安定化する, 情報処理, Vol.39, No.2, pp.111-115 (Feb. 1998).
- 7) Stetter, H.: *Numerical Polynomial Algebra*, SIAM (2004).
- 8) 山本哲朗: 区間多項式のロバスト安定性に関する Kharitonov の定理をめぐって, 電子情報通信学会誌, Vol.81, No.2, pp.174-182 (1998).

(平成 21 年 3 月 9 日受付)

関川 浩(正会員)

sekigawa@theory.brl.ntt.co.jp

1989 年東京大学大学院理学系研究科修士課程修了. 同年日本電信電話(株)入社. 現在, 同社 NTT コミュニケーション科学基礎研究所主任研究員. 数式処理, 数値数式融合計算の研究に従事. 博士(数理学). 日本数式処理学会, 電子情報通信学会, 日本応用数理学会各会員.