数理解析研究所講究録
1038 巻 1998 年 170-176

安定化理論の新しい使い道

NTTコミュニケーション科学研究所 白柳 潔 (Kiyoshi Shirayanagi)

1. はじめに

最近、近似代数や数値数式融合計算なる分野 [10, 7] の台頭が著しい。欧米でも Symbolic-Numeric Algebra for Polynomials という分野が出現し、研究が活発になってきている [6]。そんな状況の中で、筆者と M. Sweedler は、アルゴリズムの安定化理論 [16] を発表した。多くの研究者が、「ノイズのある入力から、意味のある出力を探し求める」という立場であるのに対し、安定化理論では、「正確な入力から、近似計算によって、正確な出力に接近する」という立場をとっている。安定化の手法の基本は、

1. アルゴリズムの構造は変えない、
2. データの「係数」を「区間係数」に変える、
3. 条件文において「区間係数の書換え」を行なう、

の 3 つである。詳細は [16, 14] に譲るが、この手法によって安定化されたアルゴリズムを使うと、十分高い精度桁で近似計算を行なえば、元のアルゴリズムを正確演算で実行したときの過程をシミュレートできる。換言すれば、近似入力が真の入力に収束すれば、対応する近似出力も真の出力に収束することがいえる。

本論は、安定化手法のこれまでの応用例や得られた知見などを記した上で、今後の新しい利用のあり方を探るものである。主に近似解の発見に役立てるための手法に重点を置いた。

2. これまでの応用例

安定化理論がこれまでに応用された例を表に示す。区間および区間演算はすべて浮動小数点近似によるものである。各々の詳細については、表中の参考文献を参照されたい。

アルゴリズム	出力	(実験者 実験年) 参考文献
Buchberger	Gröbner 基底	(白柳 93) [12], (尾崎 94) [8], (日吉 97) [2]
Sturm	実根の個数	(関川 95) [15]
Graham	2 次元凸包	(関川 95) [11]
単因子法	Jordan 標準形	(新妻 96) [5]
Greville	一般逆行列	(水口 96) [4]

最後の一般逆行列は、後に 3.2. 節で主役を演ずる Moore-Penrose 型一般逆行列である。これは、線形方程式 $A\vec{x} = \vec{b}$ を解くときに重要な武器となる。厳密解がないときでも、A

の Moore-Penrose 型一般逆行列を A^+ と書くと、$\vec{x}_0 = A^+\vec{b}$ は最小 2 乗解となる。その意味は、ノルム $\|\cdot\|$ をユークリッドノルム、すなわち、各成分の自乗の和の平方根としたとき、$\|A\vec{x}_0 - \vec{b}\|$ が最小となることである。詳細は [9] を見よ。更に、Moore-Penrose 型一般逆行列は、連想記憶やパターン認識などに工学的な応用をもつ。[18] を参照されたい。

さて、表で示した種々の実験の結果から共通に得られた知見は、以下の通りである。

1. 従来の浮動小数点計算では、高速であるが、精度桁をいくら上げても信頼できる答が得られない。
2. 正確計算では、特に係数が無理数の場合は、膨大な時間を要するか、メモリ容量を大幅に超えて計算不能に陥る。
3. 安定化手法によれば、区間解析法と同程度の速さで、普通の浮動小数点計算や区間解析法よりも信頼できる答が得られる。精度桁も比較的低い値でよい。

もちろん、これらの知見は入力に依存し、いつも安定化手法が優勢というわけではない。実際、グレブナ基底の場合など、入力の多項式の次数や項数があまり大きいと、(実はどの方法でも) 好結果が得られないことがある。なぜならば、この場合は、アルゴリズムの実行中に、係数膨張というよりもむしろ多項式自体の大きさ (次数や項数) の膨張をもたらすので、浮動小数点計算あるいは区間計算といえども、それを撃退するのが難しいからである。裏を返せば、正確演算で計算したときに「係数膨張のみが計算の遅い主要な要因」と思われるとき、安定化手法は役に立つという経験則が得られている。

安定化理論に対し、これまでに受けた評価は賛否両論に分かれる。例えば安定化に至る精度桁について言えば、肯定派からは、有限桁でいつかは信頼できる答えが返ってくるだけで有難いとする意見がある一方、否定派には、具体的に桁数がわからなければ実用的でないとする意見もある。今後は、後者のような批判を真摯に受け止め、様々なアルゴリズムで大量に実験を行ない、アルゴリズムごとに精度桁に関する統計的な結果を示す必要があるだろう。

3. 新しい利用法

3.1. 厳密解構成法

本論では、安定化手法を最大限に生かすにはどうすればよいかについて、2 つの利用法を提案したい。一つは厳密解を構成するための方法、一つは近似解を発見するための方法である。前者の厳密解の構成法は、既に [17, 13] で提案、発表したので、ここでは簡潔に述べる。安定化したアルゴリズムをある精度桁で実行しながら、正確係数及び行なわれた演算についての *log* (計算履歴) をとる。実行終了後に log から、正確係数の出力を復元する。それが真の出力の候補となる。この候補が真の解であることが検証できれば、それを返し、そうでなければ入力の精度桁を上げて再実行する。この log をとる方法は、計算幾何学における lazy arithmetic[3] の考え方に似ている。

本手法の特徴は、途中の正確演算を省くことができることである。正確演算を実行するのは、最終的に log から出力に復元するときだけである。従って、中間係数膨張が激しいにもかかわらず、最終の係数がそれほど大きくないような場合は、本手法は有効である。実

際、グレブナ基底を求めるときにその有効性を確かめた [17, 13]。その他、多変数多項式の除算や拡張ユークリッド互除法など、出力候補の正しさの検証が容易な場合も有効である。

近似解発見法については、次節で詳しく説明する。

3.2. 近似解発見法

3.2.1. 近似解の定義

$I=(r_1,\ldots,r_n)$ を n 次元実ベクトルとする。$\mathcal{A}$ を入力 I に対して I に直交する長さ 1 の n 次元実ベクトル $O=(s_1,\ldots,s_n)$ を出力するアルゴリズムとせよ。$\mathcal{A}$ の出力が正しいかどうかを確認するのは易しい。つまり、$O=(s_1,\ldots,s_n)$ が次の 2 つの方程式を満足するかどうかをチェックすればよい。

$$x_1{}^2+\cdots+x_n{}^2=1$$

$$r_1x_1+\cdots+r_nx_n=0$$

そこで、$x_1,\ldots,x_n$ についての 2 つの関数

$$x_1{}^2+\cdots+x_n{}^2-1$$

$$r_1x_1+\cdots+r_nx_n$$

からなる集合を $\mathcal{F}(I)$ と書く。O が $\mathcal{A}$ の I に対する正しい出力であるための必要十分条件は、$\mathcal{F}(I)$ の各関数が O 上で 0 となることである。

さらに、2. 章で触れた Moore-Penrose 型一般逆行列の例を考えよう。$m\times n$ 実行列 A が与えられたとき、$n\times m$ 行列 G が A の Moore-Penrose 型一般逆行列であるかどうかを判定することを考える。そのためには、定義により、次の 4 つの条件を満たしているかどうかをみればよい。

(i) $AXA-A=0$

(ii) $XAX-X=0$

(iii) $(AX)^T-AX=0$

(iv) $(XA)^T-XA=0$

"行列変数" X が $n\times m$ 行列 $\{x_{ij}\}_{i,j}$ (各成分 x_{ij} が変数) で表されているならば、上記の行列方程式は、G の成分が満たすべき代数方程式の系とみることができる。その系の各方程式は、

$$\text{“}x_{ij}\text{ についての関数”}=0$$

という形をしている。この各方程式から、右辺の "$=0$" を除去した関数の集合を $\mathcal{F}$ と書こう。このとき、G が A の Moore-Penrose 型一般逆行列であるかどうかという問題は、$\mathcal{F}$ の各関数が G の成分上でゼロとなるかどうかという問題と同値となる。$\mathcal{F}$ の各関数の係数は

Aの係数で表現されるので、$\mathcal{F}$の各関数はAでパラメトライズされている。その意味で$\mathcal{F}$を$\mathcal{F}(A)$と書く。

入力Iに対し、Iでパラメトライズされる関数の族$\mathcal{F}(I)$を考える。$\mathcal{F}(I)$の各元Eに対し$E(O)=0$が成立するとき、Oを$\mathcal{F}(I)$の零点と呼ぶ。Moore-Penrose型一般逆行列の例に留まらず、初期条件Iに依存する多くの代数的な問題に対し、Oがその問題の解であるかどうかは、Iでパラメトライズされる関数の族がO上でゼロになるかどうかに帰着される。従って、アルゴリズム$\mathcal{A}$が入力Iに対し、与えられた問題の解を与えるかどうかは、そのアルゴリズムが入力Iに対し、$\mathcal{F}(I)$のゼロ点である出力を与えるかどうかということになる。

ここで$\mathcal{F}(I)$の各関数の“近似的なゼロ点”を元の問題の近似解と考えるのは、自然なことである。O'が$\mathcal{F}(I)$の各関数の“近似的なゼロ点”であることを、ある“ノルム”$\|\cdot\|$と“しきい値”ϵを使って、

$$\|E(O')\| < \epsilon \text{ for } \forall E \in \mathcal{F}(I)$$

が成り立つこととすればよい。これが成り立つとき、O'を$\mathcal{F}(I)$のϵ近似解と呼ぶ。この場合、O'と$\mathcal{F}(I)$の真のゼロ点との距離自体は不要であるが、実用的には、この距離について何らかの理論的な評価があれば望ましい。後述するようにMoore-Penroseの例ではそれが存在する。

さて、次にこの近似解を得るために安定化手法をどう応用すればよいかについて説明する。以下を仮定する。

- アルゴリズム$\mathcal{A}$のすべての入力Iに対し、$\mathcal{F}(I)$の各関数は連続関数である。
- アルゴリズム$\mathcal{A}$を入力Iで実行すると、その出力は$\mathcal{F}(I)$のゼロ点となる。

$\mathcal{A}$を安定化したアルゴリズムを$Stab\mathcal{A}$とせよ。まず、Iに収束する区間列$\{[I_i,\iota_i]\}_n$を用意する。すなわち、“$\|I_i - I\| \leq \iota_i$”かつ“$\iota_i \to 0$”である。そこで、次のような手続きを実行する。

1. $i :=$ 初期精度
2. $O_i := Stab\mathcal{A}([I_i,\iota_i])$
3. **if** $\|E(O_i)\| < \epsilon$ for $\forall E \in \mathcal{F}(I)$
   then return O_i
   else iを上げて **goto** 2.

ただし、O_iは、各区間係数から誤差項を除去して普通の係数に戻した結果とする。

安定化理論[16]より、$O_i \to O$が保証される。$\mathcal{F}(I)$の各関数の連続性より、$E(O_i) \to E(O)=0$ for $\forall E \in \mathcal{F}(I)$を得る。よって、ある$i$があって、$\|E(O_i)\| < \epsilon$ for $\forall E \in \mathcal{F}(I)$となり、上の手続きは必ず停止し、目的の近似解を与える。

さて、Moore-Penroseの例では、ϵ近似解と真の解との距離について評価できると書いた。それについて一言触れておく。行列Aに対し、Moore-Penroseの$\mathcal{F}(A)$のϵ近似解(の一つ)をA^+_ϵと書こう。“行列ノルム”$\|\cdot\|$が三角不等式を満たすならば、

$$\|A^+_\epsilon - A^+\| < (2\|A^+\|\|A\| + 2\|A\| + 1)\epsilon + (6\|A^+\| + 2)\epsilon^2$$

が成り立つ。(特に、$\epsilon \to 0$のとき、$A_\epsilon^+ \to A^+$である。) 上の評価により、あるδで$\|Y - A^+\| < \delta$を満たす行列Yを求めたいときは、$Y = A_\epsilon^+$とするためにϵをどれくらいにすればよいかの目安が立つ。

3.2.2. 近似一般逆行列の計算

前節の方法により、実際にMoore-Penrose型一般逆行列の近似を計算する。Moore-Penrose型一般逆行列を計算するアルゴリズムとして、Grevilleのアルゴリズム [1] を選ぶ。これは安定化がしやすいなどの理由からである。A_ϵ^+の計算法は以下のようになる:

A_ϵ^+の計算法:

1. $i :=$ 初期精度
2. $G_i := \mathit{StabGreville}([A_i, \alpha_i])$
3. **if** $\|AG_iA - A\| < \epsilon$
   かつ $\|G_iAG_i - G_i\| < \epsilon$
   かつ $\|(AG_i)^T - AG_i\| < \epsilon$
   かつ $\|(G_iA)^T - G_iA\| < \epsilon$
   then return G_i
   else iを上げて **goto** 2.

ただし、$[A_i, \alpha_i]$は区間行列であり、その各(k,l)成分は、Aの(k,l)成分の精度桁iの区間(浮動小数点近似とその誤差上界)である。

水口(愛媛大、1997)による計算機実験を紹介する。計算機HP9000/735上でRisa/Asirを使った。但し、浮動小数点パッケージはPARIからbigfloatを呼んでいる。Grevilleのアルゴリズムを素朴に数値計算で実行した結果と安定化した*StabGreville*を実行した結果とを比較した。$\|E(G_i)\|$は、$\|AG_iA - A\|$, $\|G_iAG_i - G_i\|$, $\|(AG_i)^T - AG_i\|$, $\|(G_iA)^T - G_iA\|$の相加平均をとったものである。

- **20 × 18 ランダム有理数行列**

計算時間 (sec):

精度桁	数値計算	安定化
9	0.5	3.23
48	0.68	3.44
96	0.94	4.13
144	1.29	4.96
192	1.79	6.29
240	2.39	7.87
298	3.31	10.09
346	4.11	12.25
394	5.06	14.67

厳密計算では 7,259 sec.

$\|E(G_i)\|$:

精度桁 i	数値計算	安定化
9	1.7 E6	3.6 E-1
48	7.9 E97	1.5 E-52
<u>96</u>	7.7 E194	<u>1.6 E-104</u>
144	1.1 E290	1.9 E-152
192	2.7 E386	1.0 E-200
240	1.4 E483	1.0 E-248
298	1.1 E599	1.3 E-306
346	2.5 E695	1.0 E-354
394	1.3 E791	5.5 E-403

例えば $\epsilon = 10^{-100}$ ならば、A_ϵ^+ を得るのに $i = 96$ で十分であることがわかる。

- **$\sqrt{2}$ を含む 20 × 18 ランダム行列**

計算時間 (sec):

精度桁	数値計算	安定化
9	0.5	3.29
48	0.63	3.42
96	0.83	4.01
144	1.18	4.90
192	1.56	5.85
240	2.06	7.41
298	2.80	9.42
346	3.48	11.44
394	4.25	13.62

厳密計算では、10,000 sec 以上 (計算打切り)。

$\|E(G_i)\|$:

精度桁 i	数値計算	安定化
9	1.0 E6	2.5 E2
48	6.4 E95	1.1 E-44
<u>96</u>	1.8 E192	<u>5.4 E-102</u>
144	4.7 E288	1.0 E-149
192	2.5 E384	1.5 E-188
240	6.7 E480	1.8 E-246
298	1.6 E597	4.7 E-304
346	2.4 E692	3.0 E-352
394	2.6 E789	1.2 E-390

同様に、$\epsilon = 10^{-100}$ ならば、$i = 96$ で十分である。

4. おわりに

安定化手法の新しい応用の可能性について示した。近似解発見法では、ノルムとしきい値による近似解の判定が計算量的に廉価であれば有効であり、さらに真の解との距離の理論的な評価があればなお望ましい。一般逆行列はその好例といえる。

本論は、新しい利用法を提案したものの、従来の利用法を否定するわけではない。従来の利用法においても、さらなる計算機実験や精度桁の解析の重要性は依然存在する。今後の課題としては、工学への具体的な応用や自動安定化システムの構築などが挙げられる。

参 考 文 献

[1] Greville, T. N. E.: Some Applications of the Pseudoinverse of a Matrix, *SIAM Review*, **2** 1 (1960), 15–22.

[2] 日吉: 計算代数・計算幾何における近似計算の利用法, 東京大学 (計数工学)1996 年度修士論文 (1997).

[3] Michelucci, D. and Moreau, J.-M.: Lazy Arithmetic, *IEEE Trans. Comput.*, **46** 9 (1997), 961–975.

[4] 水口, 白柳: 安定化理論の一般逆行列への応用, 数式処理, **6** 1 (1997), 45–46.

[5] 新妻, 白柳: 浮動小数ジョルダン標準形の安定化, 数理解析研究所講究録, **986** (1997), 195–205.

[6] 野田: SNAP96 (Workshop on Symbolic-Numeric Algebra for Polynomials), 数式処理 **5** 1 (1996), 58–60.

[7] Noda, M-T. and Sasaki, T.: Approximate GCD and Its Application to Ill-conditioned Algebraic Equations, *J. Computational and Applied Mathematics*, **38** (1991), 335–351.

[8] 尾崎, 白柳: Maple の Interval Package を用いた浮動小数グレブナ基底の計算, 数理解析研究所講究録, **920** (1995), 38–52.

[9] Rao C. R. and Mitra S. K.: *Generalized Inverses of Matrices and its Applications, John Wiley & Sons* (1971).

[10] 佐々木: 近似的代数計算法, 数理解析研究所講究録, **676** (1988), 307–319.

[11] 関川, 白柳: 凸包アルゴリズムの安定化, 日本数式処理学会第 4 回大会資料 (1995).

[12] Shirayanagi, K.: Floating Point Gröbner Bases, *Mathematics and Computers in Simulation*, **42** 4-6 (1996), 509–528.

[13] 白柳: 安定化理論と出力の妥当性について, 数式処理, **5** 1 (1996), 46–47.

[14] 白柳: アルゴリズムの安定化理論, 数式処理, **5** 2 (1997), 2–21.

[15] 白柳, 関川: ゼロ書換えに基づいた区間法と Sturm のアルゴリズムへの応用, 電子情報通信学会論文誌 A, **J80-A** 5 (1997), 791–802.

[16] Shirayanagi, K. and Sweedler, M.: A Theory of Stabilizing Algebraic Algorithms, *Technical Report 95-28, Mathematical Sciences Institute, Cornell University* (1995), 92 pages.

[17] Shirayanagi, K. and Sweedler, M.: Automatic Algorithm Stabilization, *ISSAC'96 poster session abstracts* (1996), 75–78.

[18] Therrien C. W.: Eigenvalue Properties of Projection Operators and Their Application to the Subspace Method of Feature Extraction, *IEEE Trans. Comput.*, **C-24** (1975), 944–948.