

浮動小数グレブナー基底の安定な算法を目指して

Towards a Stable Algorithm for Floating-point Gröbner Bases

佐々木 建昭 (Tateaki Sasaki) *

筑波大学 名誉教授
(UNIVERSITY OF TSUKUBA)

Abstract

本稿は浮動小数を係数とする多変数多項式イデアルのグレブナー基底計算を扱う。この種の計算では初期誤差の伝播・拡大を徹底的に抑止することが必要で、過去 20 年以上も世界の研究者が取り組んだが、満足できる算法は未だ存在しない。数値計算では 1958 年に発表された Householder 消去が、誤差の伝播・拡大の抑止に極めて有効なことが知られている。そこで本稿では、Householder 消去を用いて算法の安定化を試みる。グレブナー基底計算の全体あるいは一部は、関連する多項式の係数ベクトルを行とする行列 (簡約行列と呼ぶ) の消去に帰着できる。簡約行列は Householder 消去により安定に消去されると思うだろうが、簡約行列は不規則に疎で、Householder 消去には悪設定 (ill-posed) なことが多く、良設定化 (well-posing) を如何に行うかが問題である。本稿では、L-簡約と S-多項式生成を行う際に、これら演算の引数となる多項式以外の多項式を簡約行列にスタビライザ (stabilizer) として入れることで良設定化を図る。浮動小数演算では多くの L-簡約と S-多項式が巨大誤差の原因なので危険だが、それらもスタビライザとしては使用できる；そのような L-簡約と S-多項式をゴースト (ghost) と命名した。ゴーストは筆者の算法では重要な役割を果たす。算法はまだ未完成なので、本稿では準備計算と今後の方針について述べる。

1 はじめに

筆者は浮動小数グレブナー基底を 2 種に分類した [10]。第一種は、入力多項式は正確な係数だが何らかの理由 (大抵は計算の効率化) で係数を浮動小数に変換する。第二種は入力多項式の係数が元から浮動小数で誤差を含む。第 2 章で示すが、グレブナー基底計算は係数ベクトルを行とする行列の消去に帰着でき、有名な Buchberger 算法は軸選択無しの Gauss 消去と同じである。Gauss 消去は消去の軸要素が小さいとき大きな桁落ち誤差を引き起こす。入力多項式には異なる大きさの係数が混在することが多く、Buchberger 算法を浮動小数係数で実行すると、入力精度が全て失われて全く誤った答えが得られることが頻繁にある。第一種では、入力係数は任意精度の浮動小数に変換できるので、誤差が許容限界を超えれば入力係数をさらに高精度の浮動小数に変換して再計算すればよい。しかし、第二種ではその便法は使えず、初期誤差の増大を徹底的に抑える算法が必要である。本稿で扱うのは第二種である。

浮動小数グレブナー基底の算法研究は 1995 年頃から世界の名だたる研究者が取り組んだが、未だに満足いく算法がないのが現状である；これについては [10, 9] を参照されたい。浮動小数グレブナー基底計算用の従来算法は二つに大別できる。第一は、Buchberger 算法を実行すれば

*sasaki@math.tsukuba.ac

現れるであろう単項式を全て含むように、初期多項式を単項式倍した多数の多項式を用意し、それらの係数ベクトルを行とする巨大行列を上三角化するものである [6, 7]。この算法は、必要な単項式の理論的上界が非常に大きいので現実的でない。第二は Buchberger 算法に誤差増大の抑止機能を付加するものである。こちらは多数の研究があるが、上述のとおり満足いくものは未だになく、多くの研究者は研究から手を引いた。

筆者は 2005 年頃から第二種の浮動小数グレブナー基底（および近似グレブナー基底）を研究してきた。前述の Gauss 消去における桁落ち誤差とは、Buchberger 算法では微小主係数が引き起こす**主要項の組織的なキャンセル**による。筆者はこれまで、**微小主係数記号化法** [10]・微小主係数を記号で表して主要項のキャンセルによる誤差を除くが記号化しないものは除けない、**高精度化法** [8]・主要項のキャンセルによる誤差を完全に除くが不正確な項キャンセルによる桁落ち誤差は除けない、**係数マーキング法** [9]・入力係数に“マーク”を付け不正確な桁落ち誤差を検出する（近似グレブナー基底算法で“近似シジジー”の検出に用いる）、等を提案した。その中で最も実用的といえるのは**簡約行列法** [12]であろう。この方法は、Buchberger 算法を係数の精度が十分に残る程度に部分的に実行したあと、その過程を行列（**簡約行列**と命名）に変換し、その行列を軸選択 Gauss 法で消去して当該多項式を再計算し、Buchberger 算法で失われた精度を回復する。そして、精度を回復しつつ、算法を最後まで進めていく。しかし、それでもなお誤差は完全には除去できない。その理由は筆者が [13] で明らかにした。

[13] は、Buchberger 算法の全計算を（時に S 多項式を生成しつつ）一つの多項式が他の多項式を可能な限り簡約するのを一塊とする小部分に分割し、各部分で組織的な項キャンセルがどう起きるかを理論的に分析した。その結果、（後出の式 (4.2) 左辺のように）同じ多項式 D で簡約された多項式どうしの中で簡約が行われるならば組織的項キャンセルが起き、そして、多項式 D の主係数が微小ならば桁落ち誤差が生じることを証明した。簡約行列が上述の小部分を完全に含むことはほとんど有り得ないので、たとえ簡約行列を軸選択 Gauss 法で消去しても組織的桁落ち誤差を完全に除去することはほとんどできないのである。

一方、数値計算の分野では行列の消去法として Householder 消去 [4] も有名で、特に疎行列の誤差増大の抑止に有用とされている。Householder 消去の特徴は、例えば第一列の消去では第一列の全ての非零要素を同時に用いる。Gauss 消去は二つの要素だけを用いて消去する**二元消去法**であるが、Householder 消去は**多元消去法**なのである。さて、Buchberger 算法は二つの多項式から別の多項式を生成するが、その際、主項同士を消去するという点で二元消去である。そして、上述のように、組織的な桁落ち誤差の除去が非常に難しい。そこで、二元消去でなく多元消去に基づく算法を作れば、組織的な桁落ち誤差が除去できるのではないかと期待される。本稿は簡約行列を Householder 法で安定に多元消去する算法を探求するものである。

第 2 章では、L-簡約と S-多項式の組合せからなる簡約行列を復習し、逆に簡約行列が定める多項式の行列式表現を与える。そして、浮動小数グレブナー基底の安定化の必要条件を述べる。第 3 章では、Householder 消去を簡単に復習し、Householder 消去が微小主係数の多項式による組織的桁落ちと微小主係数の誤差伝播に非常に強いこと、Householder 消去には悪設定の行列があることを具体例を用いて指摘する。そして、良設定行列と悪設定行列を理論的に解析する。第 4 章では、Householder 消去に対する悪設定の簡約行列を二つの型に分類し、それぞれの型の簡約行列に対して良設定化の技法を呈示する。良設定化の基本はスタビライザの追加である。第 5 章では、探求中の算法の特徴と今後の研究方針について述べる。

なお、本研究はまだ算法の開発段階にあるので、巨大主係数の多項式は扱わず、与えられた多項式イデアルは近似シジジーを含まないと仮定する。

2 簡約行列の復習、安定なグレブナー基底算法とは？

本稿では、固定精度浮動小数の集合を \mathbb{F} で、変数 x_1, \dots, x_ℓ を \mathbf{x} で表す。係数のない単項式 $x_1^{e_1} \cdots x_\ell^{e_\ell}$ をべき積 (power product) という。 $\mathbb{F}[\mathbf{x}]$ の全てのべき積は一意に順序付けられるが、 \succ はその順序付けを行う整列順序 (well-order) を表す。 P_1, \dots, P_n は $P_1 \succ \cdots \succ P_n$ を満たすべき積とし、 $\mathbb{F}[\mathbf{x}]$ の多項式を $F = f_1 P_1 + \cdots + f_n P_n$ ($f_i \in \mathbb{F}$) とする。このとき、 $\text{Ltm}(F)$, $\text{Lc}(F)$, $\text{Lpp}(F)$ はそれぞれ F の主項 $f_1 P_1$, 主係数 f_1 , 主べき積 P_1 を表し、 $\text{supp}(F)$ は F の台を表し、 $\text{Rest}(F)$ は F の残余を表すとす： $\text{supp}(F) = \{P_1, \dots, P_n\}$, $\text{Rest}(F) = F - \text{Ltm}(F)$ 。また、 $\|F\|$ は F のノルム (本稿では無限大ノルムを採用する) を表す： $\|F\| = \max\{|f_1|, \dots, |f_n|\}$ 。 $\mathbb{F}[\mathbf{x}]$ の要素 F_1, \dots, F_l で生成されるイデアルを $\langle F_1, \dots, F_l \rangle$ で表す。 $\text{Lred}(F, G)$ は F の G による主項簡約 (L-reduction) を、 $\text{Spol}(F, G)$ は F と G の S-多項式 (S-polynomial) をそれぞれ表す： $\text{Lred}(F, G) = \text{Lc}(G)F - \text{Lc}(F)(\text{Lpp}(F)/\text{Lpp}(G))G$, $\text{Spol}(F, G) = \text{Lc}(G)(L/\text{Lpp}(F))F - \text{Lc}(F)(L/\text{Lpp}(G))G$, where $L = \text{lcm}(\text{Lpp}(F), \text{Lpp}(G))$ 。

2.1 簡約行列と随伴多項式

最初に、簡単な場合における簡約行列を説明する。与多項式 $F_1, \dots, F_m \in \mathbb{F}[\mathbf{x}]$ から L-簡約と S-多項式生成により多項式 F_l ($l > m$) が生成されたとする。生成過程をたどれば、 F_l は

$$F_l = a_1 F_1 + \cdots + a_m F_m, \quad a_i \in \mathbb{F}[\mathbf{x}] \quad (i=1, \dots, m). \quad (2.1)$$

と表される。上式の右辺を行列で表そう。べき積集合 \mathcal{P}_l を次式で定める。

$$\begin{aligned} \text{supp}(a_i) &\stackrel{\text{def}}{=} \{Q_{i,1}, \dots, Q_{i,\mu_i}\} \quad (i=1, \dots, m), \\ \mathcal{P}_l &= \cup_{i=1}^m \text{supp}(a_i F_i) \stackrel{\text{def}}{=} (P_1, P_2, \dots, P_n), \quad P_1 \succ P_2 \succ \cdots \succ P_n. \end{aligned} \quad (2.2)$$

F_l は \mathcal{P}_l により $F_l = f_{l,1} P_1 + f_{l,2} P_2 + \cdots$ と表される； $(f_{l,1}, f_{l,2}, \dots)$ を F_l の係数ベクトル (coefficient vector) と呼ぶ。式 (2.1) より、 F_l の係数ベクトルは $Q_{i,j} F_i$ ($1 \leq i \leq m$; $1 \leq j \leq \mu_i$) を \mathcal{P}_l で展開した係数ベクトルとしても表すことができる。それらの係数ベクトルを行とする $\bar{\mu} \times \bar{n}$ 行列を M とする；ここで、 $\bar{\mu} = \mu_1 + \cdots + \mu_m$ であり、第 j 列はべき積 P_j に対応する。

$$M = \begin{pmatrix} \text{coefficient vector of } Q_{1,1} F_1 \\ \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\ \text{coefficient vector of } Q_{1,\mu_1} F_1 \\ \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\ \text{coefficient vector of } Q_{m,1} F_m \\ \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\ \text{coefficient vector of } Q_{m,\mu_m} F_m \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

これが (2.1) の右辺を行列化したもので、行列 M を F_l の簡約行列 (reduction matrix) と呼ぶ；名前の由来は M を上三角化すれば最後の行が F_l の係数ベクトルになるからである。

一般の簡約行列は次のように作られる。 F_1, \dots, F_m から L-簡約と S-多項式生成により多項式 F_1, \dots, F_λ ($\lambda \geq 2$) が計算されたとしよう。各 F_i は $F_i = a_{i,1} F_1 + \cdots + a_{i,m} F_m$ と表される。一般の場合には、べき積集合 $\mathcal{P} = \{P_1, P_2, \dots, P_n\}$ を各 F_i に対するべき積集合の集合和とし、 F_i の F_j での展開係数 $a_{i,j}$ ($1 \leq i \leq \lambda$; $1 \leq j \leq m$) に現れる各べき積 Q に対して、 $Q F_j$ を \mathcal{P}

で展開して係数ベクトルに変換する。こうして得られる全ての異なる係数ベクトルを行とする行列を作ればよい。出来上がった行列を上三角化すれば、 F_i に対する部分行列の簡約から F_i の係数ベクトルが得られる。

逆に、サイズ $m \times n$ ($m < n$) の簡約行列 M が与えられたとき、それが表す多項式を行列式で表すことができる [3]。 M の要素を $a_{i,j}$ ($1 \leq i \leq m; 1 \leq j \leq n$) とすれば、 M を完全に簡約したとき、最後に得られる行ベクトルを係数ベクトルとする多項式 \tilde{F} は次式で与えられる。

$$\tilde{F} = \sum_{j=m}^n \begin{vmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,m-1} & a_{1,j} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{m,1} & \cdots & a_{m,m-1} & a_{m,j} \end{vmatrix} P_j. \quad (2.4)$$

\tilde{F} は M の**随伴多項式** (associated polynomial) と呼ばれる。なお、 M の左端の $m-1$ 列が線形従属なこともあるが、その場合には線形独立になるまで列を削除して行列式を作る [13]。一方、簡約行列を消去する場合には、消去のある段階で複数列が一度に消去されるので、事前に列を削除する必要はない。

2.2 浮動小数グレブナー基底の安定な算法とは？

安定な計算とはどういうものか？ 筆者は次の非常に強い条件が必要だと考えている。

必要条件-1: 主要項の組織的なキャンセルによる桁落ち誤差を起こさないこと

この種の桁落ちは、 D を微小主係数の多項式とすると、 $\text{Op}(\text{Op}'(F, D), \text{Op}''(G, D))$ 等で起きる；ここで Op は Lred または Spol である (後出の (4.2) 参照)。

必要条件-2: 主係数に生じた精度損失 (accuracy loss) が伝播しないこと

偶発的な (accidental) 項キャンセルは浮動小数演算では不可避であり、大抵は不正確なキャンセルで、起きた項の係数の精度を損失させる。偶発的な項キャンセルは防げないが、項キャンセルで生じた精度損失の伝播は防ぐべきである。

必要条件-3: 有意な多項式の“埋没”(burying)が生じないこと

“埋没”は正確なグレブナー基底では有りえない概念で、多分、本稿で初めて定義される概念だろう。 $|\text{Lc}(D)|/|\text{Lc}(F)| = \varepsilon \|D\|/\|F\|$, $0 < \varepsilon \ll 1$ を満たす多項式 $F, D \in \mathbb{F}[x]$ による $\text{Lred}(F, D)$ を考える。 $\text{Lred}(F, D)$ の大部分は $\text{Rest}(D)$ で、 $\text{Rest}(F)$ が含まれる割合は ε である。このことを我々は“ F は有意度 (significance) $O(\varepsilon)$ で D に埋没した”という。今の場合、 F が L -簡約されたという理由で F を $\text{Lred}(F, D)$ で置き換えると、イデアルの生成元の一つをほぼ棄却することになり、得られるイデアル基底の正当性を損なうことになる。埋没には十分注意する必要がある。

必要条件-4: 不正確で組織的な桁落ち誤差が正しく検出できること

\mathbb{F} 上の多項式イデアルでは、初期多項式 F_1, \dots, F_m が各々ノルム 1 に規格化されていても、 $a_1 F_1 + \dots + a_m F_m = \tilde{F}$ において $\max\{\|a_1\|, \dots, \|a_m\|\} = 1$ でありながら、 $\|\tilde{F}\| = \varepsilon \ll 1$ となることがある。このとき、 $a_1 F_1 + \dots + a_m F_m$ を許容度 ε の**近似シジジー** (approximate syzygy) という。 [9] は**近似グレブナー基底**を論じているが、そこでは**近似シジジー**が核心をなす概念として扱われている。近似シジジーは誤差の観点からは、**不正確で組織的な桁落ち誤差**と見なされる。誤差量は近似シジジーの許容度に直結するので、この桁落ち誤差は除去すべきものではなく、誤差量を正しく検出すべきものである。

3 Householder 消去、有用性と落とし穴

本章では Householder 消去を簡単に復習した後、その有用性と落とし穴を簡単な例で説明する。なお、Householder 消去は \mathbb{C} 上の行列にも適用できるが、本稿では \mathbb{R} 上に限定する。

3.1 Householder 消去の簡単な復習

\mathbb{R} 上の m 次元列ベクトル \mathbf{v} を列ベクトル $\hat{\mathbf{v}}$ に変換する $m \times m$ 直交行列 H として、1958 年、Householder は次式を与えた [4]; (本章では $\|\cdot\|$ は 2 乗ノルムを意味する)。

$$H = I_m - 2U/\|\mathbf{u}\|^2, \quad \mathbf{u} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{v} - \hat{\mathbf{v}}, \quad U \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}^t. \quad (3.1)$$

ここで、 I_m は $m \times m$ 単位行列であり、 U は $m \times m$ 行列である。

次に、 $m \times n$ 行列 $V \in \mathbb{R}^{m \times n}$ を次の中式とする; ただし、 $m \leq n$ で $v_{11} \neq 0$ とする。

$$\begin{pmatrix} \bar{\mathbf{v}}_1 \\ \bar{\mathbf{v}}_2 \\ \vdots \\ \bar{\mathbf{v}}_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_{11} & v_{12} & \cdots & v_{1n} \\ v_{21} & v_{22} & \cdots & v_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{m1} & v_{n2} & \cdots & v_{mn} \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} \mp\|\mathbf{v}\| & v'_{21} & \cdots & v'_{1n} \\ 0 & v'_{22} & \cdots & v'_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & v'_{m2} & \cdots & v'_{mn} \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

$\mathbf{v} = (v_{11}, v_{21}, \dots, v_{m1})^t$, $\hat{\mathbf{v}} = (-\|\mathbf{v}\|, 0, \dots, 0)^t$ if $v_{11} > 0$ else $\hat{\mathbf{v}} = (\|\mathbf{v}\|, 0, \dots, 0)^t$ とすれば、上記 H は行列 V を上の右式のように変換する; これが **Householder 消去** である。 $HV = (\bar{\mathbf{v}}'_1, \bar{\mathbf{v}}'_2, \dots, \bar{\mathbf{v}}'_m)^t$ と表す。簡単な計算により、消去後の行列は次のように表せる。

$$\begin{pmatrix} \bar{\mathbf{v}}'_1 \\ \bar{\mathbf{v}}'_2 \\ \vdots \\ \bar{\mathbf{v}}'_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{\mathbf{v}}_1 \\ \bar{\mathbf{v}}_2 \\ \vdots \\ \bar{\mathbf{v}}_m \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} u_1 \\ v_{21} \\ \vdots \\ v_{m1} \end{pmatrix} \frac{u_1 \bar{\mathbf{v}}_1 + v_{21} \bar{\mathbf{v}}_2 + \cdots + v_{m1} \bar{\mathbf{v}}_m}{\|\mathbf{u}\|^2/2}. \quad (3.3)$$

$|v_{11}| \ll v_{1k} \approx \|\mathbf{v}\|$ の場合には、Householder 消去は Gauss 消去とほとんど同じである。しかし、 $|v_{11}| \ll 1$ であっても、 V の第 1 列が 2 個以上の $O(1)$ 要素を含むならば、 v_{11} は u_1 中で $\|\mathbf{v}\|$ に隠されるので、Householder 消去は $|v_{11}|$ の小ささには全く影響されない; 3.3 節の例 A を参照。Gauss 消去では $\bar{\mathbf{v}}_i$ が第 i 行に比 $|v_{i1}/v_{11}|$ で影響し、計算を不安定にすることを考えれば、このことは計算を大きく安定化させるだろう。また、微小な $|v_{11}|$ が消去に大きな影響を与えないということは、 v_{11} に含まれているかも知れない精度損失が伝播しにくいことも意味する。

3.2 Householder 消去に対する悪設定 (ill-posed) 行列

前節を読めば、Householder 消去は良いことづくめのように見えるが、現実はそうではない。グレブナー基底は多変数多項式を扱うので、簡約行列は数値計算で扱われる行列に比べ非常にかつ不規則に疎になることが多い。また、係数の大きさのばらつきが大きい。そのため、何の対策も取らないで Householder 消去を適用しても良い答えは得られない。本節では実例を計算してみるにより、どんな行列が**良設定** (well-posed) でどんな行列が悪設定かをみる。

下記では、 Row_i と Row'_i はそれぞれ例題行列とそれを Householder 消去した行列の第 i 行を表す。 Row'_i は $\text{Row}_1, \text{Row}_2, \dots$ の線形結合で表されるので、線形結合の係数からどの行が埋没したかを判定できる。線形結合自体の計算は、簡約行列にもう一列を追加し、追加列に各行を

表すシステム変数 $\%R_1, \%R_2, \dots$ を書き込んで、追加列も含めて消去を実行すればよい。さらに、個々の行列要素に桁落ち誤差が発生したかどうかも判定したい。そのために**有効浮動小数** (effective floating-point number, **efloat** と略記) を用いた。下記の例で $\#E(f, e)$ と出力されているのが有効浮動小数である。ここで、 f は計算された浮動小数値そのものであり、 e は f に含まれる桁落ち誤差の評価値である。 e は入力時に $e = 10^{-15}|f|$ と設定され、実行時には丸め誤差を無視して評価される。詳しくは [10, 12] を参照されたい。

例 A Householder 消去に良設定の行列 (消去後の最下 2 行に注目)

$$A := \begin{pmatrix} (0.1)^5 & -1.0 & 0.0 & -0.5 & 0.8 & \\ & (0.1)^5 & -1.0 & 0.0 & -0.5 & 0.8 \\ & & (0.1)^5 & -1.0 & 0.0 & -0.5 \\ 0.4 & 0.8 & -1.0 & 0.5 & 1.0 & -0.7 \\ -0.5 & -0.6 & 0.5 & 1.0 & -1.0 & 1.0 \end{pmatrix}.$$

A の全要素を倍精度 efloats に変換し、左 3 列を Householder 消去すると、 Row'_4 と Row'_5 は

$$\begin{aligned} & (\#E(+1.165863, 2.34e-15), \#E(+0.459300, 1.37e-16), \#E(+0.005758, 1.14e-15)), \\ & (\#E(-0.508841, 1.66e-15), \#E(+0.246741, 1.72e-15), \#E(-0.564482, 1.00e-15)). \end{aligned}$$

となる (先頭の 3 個の 0 は省略)。これらの行は A の 5 個の行で次のように表される。

$$\begin{aligned} \text{Row}'_4 & \simeq 0.19441 \text{Row}_1 - 0.36453 \text{Row}_2 - 0.47325 \text{Row}_3 + 0.60755 \text{Row}_4 + 0.48604 \text{Row}_5, \\ \text{Row}'_5 & \simeq 0.10444 \text{Row}_1 + 0.10444 \text{Row}_2 + 0.88093 \text{Row}_3 + 0.32639 \text{Row}_4 + 0.26111 \text{Row}_5. \end{aligned}$$

行列 A は Gauss 消去には非常に悪設定だが、Householder 消去には良設定であることがわかる。 Row'_4 と Row'_5 の消去も同様に安定に行える。□

例 B Householder 消去の適用に注意が必要な例 (消去後の最下行に注目)

$$B_1 := \begin{pmatrix} (0.1)^5 & 1.0 & -1.0 & & & \\ & (0.1)^5 & 1.0 & -1.0 & & \\ 1.0 & -1.5 & 1.5 & -2.5 & 3.0 & \\ & & 1.5 & -0.5 & -1.5 & 2.0 \end{pmatrix}, \quad B_2 := \begin{pmatrix} 0.4 & 0.8 & -1.0 & 0.5 \\ (0.1)^3 & 0.5 & -1.0 & -0.5 \\ (0.1)^5 & -0.6 & 0.7 & -1.0 \end{pmatrix}.$$

B_1 と B_2 を可能な限り Householder 消去すると最下行は次式となる (先頭の 0 要素は省略)。

$$\begin{aligned} B_1 & : (\#E(-0.242562018469, 1.87e-15), \#E(+0.970177738872, 3.37e-15)), \\ B_2 & : (\#E(-0.320491623593, 1.02e-15), \#E(-1.024370586451, 1.00e-15)). \end{aligned}$$

これらの行ベクトルを $\text{Row}_1, \text{Row}_2, \dots$ で表すと次式となる。

$$\begin{aligned} B_1 & : -0.72760 \text{Row}_1 - 0.48507 \text{Row}_2 + 7.28e-6 \text{Row}_3 + 0.48508 \text{Row}_4, \\ B_2 & : -1.94e-3 \text{Row}_1 + 0.76949 \text{Row}_2 + 0.63866 \text{Row}_3. \end{aligned}$$

B_1 の Row_3 と B_2 の Row_1 は埋没するが、最下行は安定に計算されたことが分かる。換言すると、第 1 列に最大要素を持つ行の犠牲により、最下行は安定に計算された。□

例 C Householder 消去に悪設定な行列 (消去後の最下行に注目)

$$C_1 := \begin{pmatrix} (0.1)^5 & -1.0 & 2.0 \\ 1.0 & -2.5 & 3.0 & -1.5 \\ 1.5 & 1.5 & -2.0 & -3.0 \end{pmatrix}, \quad C_2 := \begin{pmatrix} (0.1)^5 & -1.0 \\ (0.1)^5 & -1.0 \\ 1.0 & -1.5 & 1.5 & -2.5 & 3.0 \\ 1.0 & 1.5 & -0.5 & -1.5 & 2.0 \end{pmatrix}.$$

Householder 消去により、 C_1 と C_2 の最後列は次式となる (先頭の 0 要素は省略)。

$$\begin{aligned} C_1 &: (\#E(+0.999999047604, 2.01e-15), \#E(-2.000018571398, 3.00e-15)), \\ C_2 &: (\#E(+1.000003333167, 5.01e-15), \#E(-3.333176667e-6, 2.74e-15)). \end{aligned}$$

これらの行ベクトルを $\text{Row}_1, \text{Row}_2, \dots$ で表すと次式となる。

$$\begin{aligned} C_1 &: -0.99999 \text{Row}_1 + 2.86e-6 \text{Row}_2 + 4.76e-6 \text{Row}_3, \\ C_2 &: -6.66e-6 \text{Row}_1 + 0.99999 \text{Row}_2 - 3.33e-6 \text{Row}_3 + 3.33e-6 \text{Row}_4. \end{aligned}$$

消去は主要要素に桁落ち誤差がほとんどなく行われたのに、 C_1 では Row_2 と Row_3 が埋没し、 C_2 では Row_3 と Row_4 が埋没して、結果は全く受け入れられない。 \square

3.3 典型的行列に対する Householder 消去の理論的解析

行列 A を下記で定義する。ここで、 $0 < \varepsilon \ll \eta_F, \eta_G \leq 1$ とし、他の要素は $O(1)$ とする。

$$A := \begin{pmatrix} \bar{v}_1 \\ \bar{v}_F \\ \bar{v}_G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon & d_2 & d_3 & d_4 & \cdots \\ \eta_F & f_2 & f_3 & f_4 & \cdots \\ \eta_G & g_2 & g_3 & g_4 & \cdots \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

命題 1 行列 A の第 1 列を Householder 消去した行列を A' とする。 $\eta_F^2/\eta_G^2 \sim 1$ であれば、 A' では \bar{v}_F と \bar{v}_G は他の行に埋没せず、それら 2 行に組織的桁落ちは生じない。 $\eta^2 := \eta_G^2/\eta_F^2 \ll 1$ であれば、 A' では、 \bar{v}_F は \bar{v}_1 に有意度 $\max\{\eta^2, \varepsilon/|\eta_F|\}$ で埋没し、 \bar{v}_G には $\max\{\eta^2, \varepsilon/|\eta_F|\}$ の桁落ちが生じる (A' の第 2 行の主要ベクトルに桁落ちは生じない)。 \square

Proof 証明では 1 に対して $O(\varepsilon^2)$ を棄却する。第 1 回目の消去では、 $\mathbf{v} := (\varepsilon, \eta_F, \eta_G)^t$ 、 $\hat{\mathbf{v}} := (-\|\mathbf{v}\|, 0, 0)^t$ なので、 $\mathbf{u} \simeq (\varepsilon + \sqrt{\eta_F^2 + \eta_G^2}, \eta_F, \eta_G)^t$ と $D \stackrel{\text{def}}{=} \|\mathbf{u}\|^2/2 \simeq \eta_F^2 + \eta_G^2 + \varepsilon\sqrt{\eta_F^2 + \eta_G^2}$ を得る。以上より、 A は下記 A' に変換される；ここで、 $u_1 \simeq \varepsilon + \sqrt{\eta_F^2 + \eta_G^2}$ である。

$$A' := \begin{pmatrix} \bar{v}'_1 \\ \bar{v}'_F \\ \bar{v}'_G \end{pmatrix} \simeq A - \begin{pmatrix} u_1 \\ \eta_F \\ \eta_G \end{pmatrix} \cdot \frac{u_1 \bar{v}_1 + \eta_F \bar{v}_F + \eta_G \bar{v}_G}{\eta_F^2 + \eta_G^2 + \varepsilon\sqrt{\eta_F^2 + \eta_G^2}}.$$

すなわち、 \bar{v}_F と \bar{v}_G はそれぞれ下記の \bar{v}'_F と \bar{v}'_G に変換される；ここで、 $S \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\eta_F^2 + \eta_G^2}$ 。

$$\begin{cases} \bar{v}'_F \simeq (1 - \eta_F^2/D) \bar{v}_F - (\eta_F/S) \bar{v}_1 - (\eta_F \eta_G/D) \bar{v}_G, \\ \bar{v}'_G \simeq (1 - \eta_G^2/D) \bar{v}_G - (\eta_G/S) \bar{v}_1 - (\eta_F \eta_G/D) \bar{v}_F. \end{cases} \quad (3.5)$$

式 (3.5) より、組織的キャンセルが起きるとすれば $(1 - \eta_F^2/D)$ と $(1 - \eta_G^2/D)$ の中だけであるから、 $\eta_F^2/\eta_G^2 \sim 1$ であれば \bar{v}'_F と \bar{v}'_G に組織的キャンセルは生じない。

一方、 $\eta_F^2 \gg \eta_G^2$ ならば、 $1 - \eta_F^2/D = 1 - 1/\{1 + \eta^2 + (\varepsilon/|\eta_F|)\sqrt{1 + \eta^2}\} \simeq \eta^2 + \varepsilon/|\eta_F|$ である；ここで、 $O(\eta^4)$ と $O(\varepsilon\eta^2)$ の項を棄却した。これから命題の後半部が導かれる。□

系 A' の第 (2,2), (3,2) 要素はそれぞれ

$$\begin{cases} A'(2,2) \simeq f_2(1 - \eta_F^2/D) - \eta_F(d_2\sqrt{\eta_F^2 + \eta_G^2} + \eta_G g_2)/D, \\ A'(3,2) \simeq g_2(1 - \eta_G^2/D) - \eta_G(d_2\sqrt{\eta_F^2 + \eta_G^2} + \eta_F f_2)/D, \end{cases} \quad (3.6)$$

となり、 $\eta_F^2/\eta_G^2 \sim 1$ であれば、偶発的キャンセルが発生しない限り微小にはならない。□

つぎに、行列 B を下記で定義する。ここで、 $0 < \varepsilon_G \leq \varepsilon_F \ll 1$ で他の要素は $O(1)$ とする。

$$B := \begin{pmatrix} \bar{v}_1 \\ \bar{v}_F \\ \bar{v}_G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & s_2 & s_3 & s_4 & \cdots \\ \varepsilon_F & f_2 & f_3 & f_4 & \cdots \\ \varepsilon_G & g_2 & g_3 & g_4 & \cdots \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

命題 2 B の左 2 列を Householder 消去しても、第 3 行には組織的桁落ちは起きない。また、 \bar{v}_1 は有意度 $|f_2\varepsilon_G - g_2\varepsilon_F|/\max\{|f_2|, |g_2|\}$ で埋没するが、 \bar{v}_F と \bar{v}_G が埋没することはない。□

Proof 証明では 1 に対して $O(\varepsilon_F^2), O(\varepsilon_G^2)$ を棄却する。第 1 回目の消去では、 $\mathbf{v} := (1, \varepsilon_F, \varepsilon_G)^t$, $\hat{\mathbf{v}} := (-\|\mathbf{v}\|, 0, 0)^t \simeq (-1, 0, 0)^t$ なので、 $\mathbf{u} \simeq (2, \varepsilon_F, \varepsilon_G)^t$, $\|\mathbf{u}\|^2/2 \simeq (4 + \varepsilon_F^2 + \varepsilon_G^2)/2 \simeq 2$ 。これより、消去後の行列 B' は次式となる。

$$B' \equiv \begin{pmatrix} \bar{v}'_1 \\ \bar{v}'_F \\ \bar{v}'_G \end{pmatrix} \simeq \begin{pmatrix} -\bar{v}_1 - \varepsilon_F \bar{v}_F - \varepsilon_G \bar{v}_G \\ (1 - \varepsilon_F^2/2)\bar{v}_F - \varepsilon_F \bar{v}_1 - (\varepsilon_F \varepsilon_G/2)\bar{v}_G \\ (1 - \varepsilon_G^2/2)\bar{v}_G - \varepsilon_G \bar{v}_1 - (\varepsilon_F \varepsilon_G/2)\bar{v}_F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\bar{v}_1 - \varepsilon_F \bar{v}_F - \varepsilon_G \bar{v}_G \\ -\varepsilon_F \bar{v}_1 + \bar{v}_F \\ -\varepsilon_G \bar{v}_1 + \bar{v}_G \end{pmatrix}.$$

B' の第 2 列は $(\cdots, f_2 - \varepsilon_F s_2, g_2 - \varepsilon_G s_2)^t$ ゆえ、第 2 回目の消去後の行列 B'' の第 3 行は

$$\begin{aligned} \bar{v}''_G &\simeq (g_2 - \varepsilon_G s_2)(-\varepsilon_F \bar{v}_1 + \bar{v}_F) - (f_2 - \varepsilon_F s_2)(-\varepsilon_G \bar{v}_1 + \bar{v}_G) \\ &= (f_2 \varepsilon_G - g_2 \varepsilon_F) \bar{v}_1 + (g_2 - \varepsilon_G s_2) \bar{v}_F - (f_2 - \varepsilon_F s_2) \bar{v}_G. \end{aligned}$$

これと $\varepsilon_F, \varepsilon_G \ll |g_2|, |f_2|$ の仮定より直ちに命題が得られる。□

最後に、行列 C を下記で定義する。ここで、 $0 < \varepsilon \ll 1$, η は 0 か $O(1)$ であり、 f_1, g_1, f_2, g_2 は $O(1)$ とする。

$$C := \begin{pmatrix} \bar{v}_1 \\ \bar{v}_F \\ \bar{v}_G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon & \eta & d_3 & d_4 & \cdots \\ f_1 & f_2 & f_3 & f_4 & \cdots \\ g_1 & g_2 & g_3 & g_4 & \cdots \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

命題 3 行列 C の先頭 1 列と先頭 2 列を Householder 消去した行列をそれぞれ C' , C'' とし、 $r = |f_1 g_2 - f_2 g_1|/\max\{|f_1 g_2|, |f_2 g_1|\} > \varepsilon$ とする。

$\eta = 0$ のとき： C'' の第 3 行の \bar{v}''_G では、 $\bar{v}_1, \bar{v}_F, \bar{v}_G$ の係数部にそれぞれ $1/r, O(1/\varepsilon), O(1/\varepsilon)$ の組織的桁落ちは生じ、 \bar{v}_F と \bar{v}_G はそれぞれ有意度 $O(\varepsilon/r)$ で \bar{v}_1 に埋没する。

$\eta = 1$ かつ $f_2 = 0$ のとき： \bar{v}''_G では、 $|f_1|, |g_1| = O(1)$ である限り、 \bar{v}_F と \bar{v}_G は埋没しないが、 $|g_1| \ll |f_1|$ ならば \bar{v}_F は有意度 $|g_1/f_1|$ で埋没する。□

(頁数の制約から証明を割愛する。次節の命題 4 の証明を参考にされたい)

4 Householder 消去に対する悪設定簡約行列の良設定化

本稿では正常および微小主係数の多項式のみを扱い、巨大主係数の多項式は扱わない。

定義 1 [多項式の規格化] 多項式 F は $\|\text{Rest}(F)\| = 1$ と規格化する。 □

定義 2 [微小主係数の基準] η_{safe} は 1 より小さいが極端には小さくない数 (筆者のプログラムでは $\eta_{\text{safe}} = 0.3$ である) とし、多項式 $F, G \in \mathbb{F}[x]$ は規格化され、 $|\text{Lc}(F)|/|\text{Lc}(G)| = \eta$ であるとする。 $\eta < \eta_{\text{safe}}$ のとき F は G に対して主係数が微小という。 □

4.1 悪設定の簡約行列の分類

3.2 節の例と命題 1, 3 より、筆者は悪設定の簡約行列を二つの型に分類する。

LC-型 (簡約行列 M の先頭列が悪設定)

M の先頭列がただ一つの要素を除き、残りの要素の絶対値が (相対的に) 微小であるもの。典型例は 3.2 節の行列 B_1 と B_2 である。また、 M の第 i 行以下で、左から $(i-1)$ 個の列の全要素が 0 である部分行列も、非零要素を含む最左列から見たとき上記のことが成立するならば、LC-型悪設定行列という。

DE-型 (簡約行列 M の要素 $M(1, 2)$ が欠損)

典型例は 3.2 節の行列 C_1 と C_2 である。これらは、1) $|M(1, 1)|$ が微小、2) $M(1, 2) = 0$ ($|M(1, 2)|$ が非零だが微小でも該当) との特徴をもつ。一般にはこの型は次のように定義される: M の第 i 行以下で、0) 左から $(i-1)$ 個の列の全要素が 0、1) $|M(i, i)|$ が微小、2) 第 $i+1$ 列が $M(i', i+1) = 0$ ($\forall i' < i$)、および $|M(i, i+1)|$ が 0 か微小である。

4.2 悪設定の簡約行列を良設定化するための幾つかの技法

簡約行列の良設定化の基本は、 $\text{Lred}(F, G)$ と $\text{Spol}(F, G)$ を構成する二つの多項式 F, G に第三の多項式 S を加え、三つの行の簡約行列として Householder 消去を安定化させることである。加える多項式あるいはその係数ベクトルをスタビライザ (stabilizer) と呼ぶ。

本節では、Op は Lred あるいは Spol を表す。 F, G は互いに微小主係数でない規格多項式で、 D は F, G に対して微小主係数の規格多項式で、 S は簡約行列を安定化するための規格多項式とする。多項式 D, F, G, S の係数ベクトルをそれぞれ、 (d_1, d_2, \dots) , (f_1, f_2, \dots) , (g_1, g_2, \dots) , (s_1, s_2, \dots) と表す。 $d_1 f_1 g_1 s_1 \neq 0$ である。

技法 1 [Lred3, Spol3 : スタビライザを用いる技法]

与多項式 $F, D \in \mathbb{F}[x]$ に対し、 $\text{Op}(F, D) = T_F F - T_D D$ (T_F, T_D は単項式) とする。このとき、第三の多項式 S を加えた $\text{Op}3$ を次式で定義する。

$$\text{Op}3(F, D, S) = \sum_{j=3} \begin{vmatrix} s_1 & s_2 & s_j \\ d_1 & d_2 & d_j \\ f_1 & f_2 & f_j \end{vmatrix} P_j. \quad (4.1)$$

ここで、 P_j は簡約行列の第 j 列に対応するべき積である。 □

$\text{Lred}3$ と $\text{Spol}3$ は LC-型悪設定行列の良設定化の主役であるが、スタビライザ S は常に存在するとは限らない; その場合に備え、制約は強いが、 $\text{Lred}2$ と $\text{Spol}2$ を導入する。

技法 2 [Lred2, Spol2 : 二つの多項式だけを使う技法] (頁数の制約から割愛する)

Lred2 も Spol2 も、 F, G と $\text{Op}(F, G)$ の主べき積に対する制約が強い。Lred3 と Spol3 でさえ弱いながら制約がある。しかし、次に定義するスーパー S-多項式 (super-Spol) には主べき積に対する制約はなく、良設定化の最終技法である。なお、この技法は昔から知られていた。

技法 3 [super-Spol : 制約なしで使える技法] $\text{Op}'(F, D)$ と $\text{Op}''(G, D)$ は次式とする。

$$\text{Op}'(F, D) = \sum_{j=2}^n \begin{vmatrix} d_1 & d_j \\ f_1 & f_j \end{vmatrix} P'_j, \quad \text{Op}''(G, D) = \sum_{j=2}^n \begin{vmatrix} d_1 & d_j \\ g_1 & g_j \end{vmatrix} P''_j.$$

ここで、 P', P'' はべき積で、任意の j に対し $Q'P'_j = Q''P''_j =: P_j$ (Q', Q'' はべき積) を満たし、 $d_j = f_j = g_j = 0$ なることはない。すると、 $\text{Spol}(\text{Op}'(F, D), \text{Op}''(G, D))$ は次式で表される。

$$\sum_{j=3} \left| \begin{vmatrix} d_1 & d_2 \\ f_1 & f_2 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} d_1 & d_j \\ f_1 & f_j \end{vmatrix} \right| P_j = d_1 \times \sum_{j=3} \begin{vmatrix} d_1 & d_2 & d_j \\ f_1 & f_2 & f_j \\ g_1 & g_2 & g_j \end{vmatrix} P_j. \quad (4.2)$$

上式で、 P_j, P'_j, P''_j に対する条件は強すぎる。 $\text{Spol}(\text{Op}'(F, D), \text{Op}''(G, D)) = T'\text{Op}'(F, D) - T''\text{Op}''(G, D)$ (T', T'' は単項式) とすれば、実際に必要な条件は $\text{Lpp}(T'\text{Op}'(F, D)) = \text{Lpp}(Q''\text{Op}''(G, D))$ であり、 $\text{Lpp}(Q'_F F)$ と $\text{Lpp}(Q''_G G)$ が同じである必要はない。次の関係式により、この場合にも式 (4.2) は成立する。

$$\sum_{j=3} \begin{vmatrix} d_1 & 0 & d_2 & d_j \\ f_1 & 0 & f_2 & f_j \\ 0 & d_1 & d_2 & d_j \\ 0 & g_1 & g_2 & g_j \end{vmatrix} P_j = -d_1 \sum_{j=3} \begin{vmatrix} d_1 & d_2 & d_j \\ f_1 & f_2 & f_j \\ g_1 & g_2 & g_j \end{vmatrix} P_j. \quad (4.3)$$

(4.2) は、 D が正常主係数の多項式でスタビライザを演じるならば、 $|d_2| = O(1)$ である限り、 $F \rightarrow D_1, G \rightarrow D_2$ (D_1, D_2 は微小主係数の多項式) なる簡約行列の安定化にも利用できる。□

最後に、DE-型の悪設定行列を良設定化する技法を述べる。容易に思いつく方法は、決定的要素の欠損を埋めるような係数ベクトルを探し、欠損要素を含む行に加えることである。その際の問題は、付加する係数ベクトルが当該の簡約行列にない新しいべき積を含めば、新しい列を追加するという面倒な作業が必要になることである。新列の追加が不必要な技法が望ましいのは言うまでもない。また、要素の欠損は簡約行列の消去中に起きる場合もあるので、消去の最中に欠損を見出したなら直ちに対処できるものであることが望ましい。下記の筆者の技法は、当該の簡約行列に含まれる 2 行を利用する。簡単さと有用さの 2 点で申し分ないだろう。

技法 4 [DE-型の簡約行列を良設定化する技法] C は下記の左側の簡約行列とする：ここで、 $0 < \varepsilon \ll 1, d_2 = 0$ (あるいは $|d_2| \ll 1$) であるが、 $|f_1|, |g_1|$ と $|f_1 g_2 - f_2 g_1|$ は $O(1)$ とする。

$$C := \begin{pmatrix} \varepsilon & d_3 & d_4 & \cdots \\ f_1 & f_2 & f_3 & f_4 & \cdots \\ g_1 & g_2 & g_3 & g_4 & \cdots \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} \varepsilon & s_2 & s_3 + d_3 & s_4 + d_4 & \cdots \\ f_1 & f_2 & f_3 & f_4 & \cdots \\ g_1 & g_2 & g_3 & g_4 & \cdots \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

F と G の係数ベクトルから $g_1 \times (f_1, f_2, \dots) - f_1 \times (g_1, g_2, \dots)$ と計算した係数ベクトルを S とすれば、 $S = (0, s_2, s_3, \dots)$ となる。行列 C の良設定化とは、 S を C の第一行に加えることである (上式の右辺が良設定化した行列である)。□

命題 4 技法 4 は、 $|f_1 g_2 - f_2 g_1| = O(1)$ である限り、上記行列 C を DE-良設定化する。一方、 $r \stackrel{\text{def}}{=} |f_1 g_2 - f_2 g_1| / \max\{|f_1 g_2|, |f_2 g_1|\} \ll 1$ ならば、 $\bar{v}_1, \bar{v}_F, \bar{v}_G$ のいずれの係数部にも $O(1/r)$ の組織的桁落ち誤差が発生するが、埋没は生じない。

Proof S を C の第一行に加えた行列を \tilde{C} とすれば、 \tilde{C} の第 1 行は $\bar{v}_1 + g_1 \bar{v}_F - f_1 \bar{v}_G$ である。したがって、 \tilde{C} の第 1 列を Householder 消去した行列は次となる (第 2, 3 行のみ表示)。

$$\begin{pmatrix} -f_1(S+\varepsilon)(\bar{v}_1 + g_1 \bar{v}_F - f_1 \bar{v}_G) + (g_1^2 + \varepsilon S) \bar{v}_F - f_1 g_1 \bar{v}_G \\ -g_1(S+\varepsilon)(\bar{v}_1 + g_1 \bar{v}_F - f_1 \bar{v}_G) - g_1 f_1 \bar{v}_F + (f_1^2 + \varepsilon S) \bar{v}_G \end{pmatrix} / D$$

ここで、 $S = \sqrt{f_1^2 + g_1^2}$ 、 $D \simeq S(S + \varepsilon)$ であり、以下では簡単のため ε -項を棄却して計算する。

第 1 列を Householder 消去したあとの行列の (2, 2), (3, 2) 要素を f'_2, g'_2 とすれば、 $D f'_2 \simeq -f_1 s_2 S - g_1 f_2 (f_1 S - g_1) + f_1 g_2 (f_1 S - g_1)$ 、 $D g'_2 \simeq -g_1 s_2 S - g_1 f_2 (g_1 S + f_1) + f_1 g_2 (g_1 S + f_1)$ である。そこで、さらに第 2 列を Gauss 消去 (= g'_2 (第 2 行) - f'_2 (第 3 行)) すれば下式となる：簡単のため D を省略し、 $[fSg] \stackrel{\text{def}}{=} f_1 S - g_1$ 、 $[gSf] \stackrel{\text{def}}{=} g_1 S + f_1$ と略記する。

$$\begin{aligned} & (-g_1 s_2 S - g_1 f_2 [gSf] + f_1 g_2 [gSf]) \times (-f_1 S \bar{v}_1 - g_1 [fSg] \bar{v}_F + f_1 [fSg] \bar{v}_G) \\ & - (-f_1 s_2 S - g_1 f_2 [fSg] + f_1 g_2 [fSg]) \times (-g_1 S \bar{v}_1 - g_1 [gSf] \bar{v}_F + f_1 [gSf] \bar{v}_G) \\ \Rightarrow & \text{上式で、} S^2 \text{ と } [fSg][gSf] \text{ を含む項は全てキャンセルする} \\ \Rightarrow & \bar{v}_1 \text{ の係数: } [gSf](f_1 g_1 f_2 S - f_1^2 g_2 S) - [fSg](g_1^2 f_2 S - f_1 g_1 g_2 S) \\ & = (g_1 f_2 - f_1 g_2)(f_1 S [gSf] - g_1 S [fSg]) = s_2 S^3, \\ & \bar{v}_F \text{ の係数: } +g_1^2 s_2 S [fSg] - f_1 g_1 s_2 S [gSf] = -g_1 s_2 S^3, \\ & \bar{v}_G \text{ の係数: } -f_1 g_1 s_2 S [fSg] + f_1^2 s_2 S [gSf] = +f_1 s_2 S^3. \end{aligned}$$

上式で正確にキャンセルする項は $f_1 g_1 s_2 S^2$ 、 $f_1^2 g_2 [fSg][gSf]$ などだが、 $|s_2| (= |g_1 f_2 - f_1 g_2|)$ が $O(1)$ ならば主要項の一部が残るので、組織的桁落ちも埋没も発生しない。□

5 新しい算法を目指して

筆者は、基本的には Buchberger の算法に従う。即ち、現在の基底 Φ_k に対して、最初に Φ_k の全要素を可能なかぎり互いに L-簡約し、つぎに Φ_k の要素対から S-多項式 H を作って Φ_k で可能な限り L-簡約し (簡約後の多項式を \tilde{H} とする)、 $\tilde{H} \neq 0$ ならば $\Phi_{k+1} := \Phi_k \cup \tilde{H}$ として同じ手順を Φ_{k+1} に繰り返し、 $\tilde{H} = 0$ ならば別の S-多項式の生成を試みる。しかしながら、筆者の算法は下記の 2 点で Buchberger の算法とは大きく異なっている。

- A) L-簡約と S-多項式生成およびそれに続く簡約は、計算手順を簡約行列 M に変換し、 M を Householder 消去して計算することで安定化を図る。
- B) L-簡約あるいは S-多項式の係数ベクトルが M の第一列から始まるかそれに準ずる場合には、(4.1) のようにスタビライザ行を追加したり、(4.2) のように他の演算と組み合わせたりして安定に消去する。

算法化における実際の問題は、1) S-多項式生成において引数である多項式を如何に選ぶか?、2) スタビライザとなる多項式(微小主係数でもよい)を如何に選び出すか、であろう。そして、本質的問題は算法の停止性の保証、であろう。

5.1 ゴースト概念の導入

S-多項式生成とL-簡約については、その引数である多項式は順位の低いものから順に選ぶ。その際、多項式 F の簡約子として(相対的に)微小主係数の多項式 D が選ばれば、 $\text{Lred}(F, D)$ をゴーストと呼び、イデアル基底 ϕ_k とは異なるシステム配列 $\%Ghos$ に収納する。同様に $\text{Spol}(F, D)$ もゴーストとして $\%Ghos$ に収納される。ゴーストは、対応するL-簡約あるいはS-多項式が安定に生成された時点で直ちに消去する。

ゴーストは、良設定化技法3の $\text{Op}'(F, D)$ としてそのまま使えるし、実際に演算を実行して(結果は F が D に埋没した危険な多項式)良設定化技法1のスタビライザ S として使用してもよい。さらには、良設定化技法3はゴーストのゴーストによるL-簡約やゴーストとゴーストのS-多項式生成も可能にする。このように、 ϕ_k には入れられない“危険な”多項式をゴーストとして貯蔵することで、本稿の目指す算法はBuchberger算法にかなり近づく。

筆者は昨年、“遅延簡約法”と呼んでいた方法を研究した。残念ながら、筆者の考えた方法は論文[13]により不完全であることが判明し、その研究は中断した。本稿のゴーストによる簡約は、遅延簡約とは逆に“先走り簡約”とも言えるものである：基底要素として生成される以前の多項式をあたかも基底要素のように扱うからである。

5.2 計算の停止性について

インプリメントについては、まだ確たることは言えないが、簡約行列にはなるべく多くの行を詰め込むことにしている。前章で述べた技法の多くはLC-型悪設定行列の良設定化であり、先頭の数列が関係するだけである。先頭列さえ良設定化してしまえば、あとはゴーストも使い多くのL-簡約を実行するのが賢明であろう。

問題は算法の停止性である。ゴーストはかなり柔軟に処理できるが、制限付きであることを忘れてはならない。筆者は上述の算法があらゆる初期基底に対して停止するだろうとは思っていない。この予想が正しければ、どのような基底に対して停止性が成立するか、との別の課題が待ち構えていることになる。

謝辞 本研究は科研費(課題番号15K00005)の援助で遂行された。

参 考 文 献

- [1] M. Bodrato and A. Zanoni. Intervals, syzygies, numerical Gröbner bases: a mixed study. *Proceedings of CASC2006 (Computer Algebra in Scientific Computing)*: Springer-Verlag LNCS 4194, 64-76, 2006.
- [2] B. Buchberger. Gröbner Bases: An algorithmic method in polynomial ideal theory. *Multi-dimensional Systems Theory*, N.K. Bose (Ed.), Chap. 6, Reidel Publ., 1985.
- [3] J.E. Collins. Subresultant and reduced polynomial remainder sequence. *J. ACM*, 14, 128-142, 1967.

- [4] A.S. Householder. Unitary triangularization of a nonsymmetric matrix. *J.ACM*, **5**(4), 339-342, 1958.
- [5] A. Kondratyev, H.J. Stetter and S. Winkler. Numerical computation of Gröbner bases. *Proceedings of CASC2004 (Computer Algebra in Scientific Computing)*, St. Petersburg, Russia, 295-306, 2004.
- [6] D. Lazard. Gröbner bases, Gaussian elimination and resolution of systems of algebraic equations. *Proceedings of EUROCAL'83*; Springer-Verlag LNCS **162**, 146-156, 1983.
- [7] K. Nagasaka. A Study on Gröbner basis with inexact input. *Proceedings of CASC2009 (Computer Algebra in Scientific Computing)*: LNCS 5743, 248-258, Springer, 2009.
- [8] T. Sasaki. A practical method for floating-point Gröbner basis computation. *Proceedings of Joint Conf. of ASCM 2009 and MACIS 2009; COE Lecture Note 22*, 167-176, Kyushu Univ., 2009.
- [9] T. Sasaki: A theory and an algorithm of approximate Gröbner bases. *Proceedings of SYNASC2011 (Symbolic and Numeric Algorithms for Scientific Computing)*, IEEE Computer Society, 23-30, 2012.
- [10] T. Sasaki and F. Kako. Computing floating-point Gröbner base stably. *Proceedings of SNC2007 (Symbolic Numeric Computation)*, 180-189, London, Canada, 2007.
- [11] T. Sasaki and F. Kako. Floating-point Gröbner basis computation with ill-conditionedness estimation. *Proceedings of ASCM2007 (Asian Symposium on Computer Mathematics): Springer LNAI 5081*, 278-292, Deepak Kapur (Ed.), 2008.
- [12] 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.
- [13] T. Sasaki. A subresultant-like theory for Buchberger's procedure. *JJIAM (Jap. J. Indust. Appl. Math.)* **31**, 137-164, 2014. 日本語版(簡単版): グレブナー基底算法における項キャンセルの一般論. 佐々木建昭, 数理研究考録 1815, 46-57, 2012 (講演は 2010 年 12 月).
- [14] H.J. Stetter. Stabilization of polynomial systems solving with Gröbner bases. *Proceedings of ISSAC'97 (Int'l. Symposium on Symbolic and Algebraic Computation)*, ACM Press, 117-124, 1997.
- [15] H.J. Stetter, Approximate Gröbner bases – an impossible concept?. *Proceedings of SNC2005 (Symbolic-Numeric Computation)*, 235-236, Xi'an, China, 2005.
- [16] C. Traverso. Syzygies, and the stabilization of numerical Buchberger algorithm. *Proceedings of LMCS2002 (Logic, Mathematics and Computer Science)*, RISC-Linz, Austria, 244-255, 2002.
- [17] C. Traverso and A. Zanoni. Numerical stability and stabilization of Gröbner basis computation. *Proceedings of ISSAC2002 (Int'l. Symposium on Symbolic and Algebraic Computation)*, ACM Press, 262-269, 2002.
- [18] V. Weispfenning. Gröbner bases for inexact input data. *Proceedings of CASC2003 (Computer Algebra in Scientific Computing)*, Passau, Germany, 403-411, 2003.