表．折れ線近似算法のまとめ（n：元の折れ線の節点数，m：誤差最小問題での指定された節点数）

近似問題		節点数最小	誤差最小
折れ線関数		$O(n)$	難しい
一般の折れ線			
誤差基準	(e1)	$O(n^2 \log n)$	$O(n^2(\log n)^2)$
	(e2)	$O(n^2 \log n)$	$O(n^2 \log n)$
	(e3)	$O(n^2 \log n)$	$O(n^2 \log n)$
	(e4)	$O(n \log n)$	$O(mn \log n \log(m/n))$

参考文献

1) Imai, H. and Iri, M. (1986). Polygonal approximations of a curve — formulations and solution algorithms, *Tech. Rep. CSCE-86-C07*, Department of computer science and communication engineering, Kyushu University, 1986.

高速自動微分法とその周辺

東京大学工学部　伊　理　正　夫・久保田　光　一

多変数関数の偏導関数を求めることは数値計算の分野で広い需要のある基本的な問題である．その際，変数の数に比例して手間が増え精度も悪いが，手軽であるということから，数値微分法が用いられることが多い．また，数式処理システムを利用した数式微分は，精度は良いが変数の個数に等しい個数の偏導関数(これらは一般に多くの共通因子，共通項を含んでいる)を全て評価する必要がある．このような現状に対し，変数の数に依存せずに関数計算に必要な手間の高々定数倍の手間で正確な偏導関数を計算する手法である高速自動微分法は注目すべき技術である．高速自動微分法は，情報の流れという点からは，本質的には最短路問題の解法と同等な手法であるとみなすこともできる[1),7)]．

高速自動微分法は，古くから折に触れ用いられてきた偏導関数の自動計算法[8)]の一種である．それは，関数を計算する過程を“基本演算”として表現し，それに対して合成関数の偏微分法を適用するというものである．最も理解し易い偏導関数自動計算法は，関数を計算する過程と併行してある一つの独立変数に関する偏導関数を計算することであろうが，高速自動微分法は，途中の計算結果を全て記憶しながら一度関数を計算した後に，関数計算の過程を遡りながら関数計算の途中結果に関する，関数値の偏導関数を求めて行く手法である．この手法の副産物として，関数の計算値に含まれる丸め誤差の理論的限界の推定（従来は非実用的であった）を十分実用的に行うことも可能となる[1),2)]．また，ベクトル値関数についてはヤコビ行列と定数列(行)ベクトルとの積を，スカラー値関数についてはヘッセ行列と定数ベクトルとの積をそれぞれ関数評価の手間の6倍，21倍以下の手間で計算することができるということもわかる[1),4),5)]．

現在，我々は，高速自動微分法の利用システムとして，関数をFORTRANの副プログラムとして記述し，これを構文解析して，高速自動微分法を実行するような副プログラムに変換するFORTRANプリプロセッサを提案，試作している[3),6)]．関数をFORTRAN副プログラムとして記述する利点はDO文，IF文等の制御構造を用いることによって，適用可能な関数の範囲が

広くなることである．実際，行列の枢軸選択を行う LU 分解や Voronoi 線図作成プログラム等を関数とみて高速自動微分法を適用することも可能である．

この試作システムを用い，大規模な関数について高速自動微分法の有効性を確認すること，丸め誤差評価を考慮した新しい数値計算法を開発することなどが，これからの課題である．

参考文献

1) Iri, M. (1984). Simultaneous computation of functions, partial derivatives and estimates of rounding errors — complexity and practicality, *Jpn. J. Appl. Math.*, **1**, 223-252.
2) 伊理正夫，土谷　隆，星　　守 (1985). 偏導関数計算と丸め誤差推定の自動化の大規模非線形方程式系への応用，情報処理，**26**, 1411-1420.
3) 岩田憲和，伊理正夫 (1983). 多変数関数の勾配の計算方法，情報処理学会数値解析研資料，**83-7**.
4) Kim, K.V., Nesterov, Yu.E. and Cherkasskiĭ, B.V. (1984). Otsenka trudoёmkosti vychisleniya gradienta, *Doklady Akademii Nauk SSSR*, Matematika, **275**, 1306-1309.
5) Kim, K.V., Nesterov, Yu.E. and Cherkasskiy, B.V. (1985). An algorithm for fast differentiations and its applications, *Abstracts of the 12th IFIP Conference on System Modelling and Optimization*, 181-182.
6) 久保田光一，伊理正夫 (1986). 高速微分法利用システム—FORTRAN プリプロセッサ，第15回数値解析シンポジウム論文集，84-87.
7) Miller, W. and Wrathall, C. (1980). *Software for Roundoff Analysis of Matrix Algorithms*, Academic Press, New York.
8) Rall, L.B. (1981). *Automatic Differentiation — Techniques and Applications,* Lecture Notes in Computer Science, Springer-Verlag, **120**.
9) Volin, Yu.M. and Ostrovskii, G.M. (1985). Automatic computation of derivatives with the use of the multilevel differentiating technique — 1. Algorithmic Basis, *Computers and Mathematics with Applications,* **11**, 1099-1114.

計算グラフによる2階偏導関数の自動計算とその応用

千葉大学工学部　西　原　　薫*・星　　守・戸　田　英　雄

関数の計算過程をグラフの形に表現し（計算グラフとよぶ），そのグラフを辿りながら関数の値や微係数を計算する方法（グラフ算法，高速微分法などとよぶ）を，ヘッセ行列を必要とする問題に適用し，その有効性を確かめた．

まず第一に，計算グラフによる1階偏導関数値計算の方法を拡張した2階偏導関数値の自動計算法を二つ示し，それらによるヘッセ行列と数値微分によるものとを比較した．グラフ算法によれば，関数形を与えるだけで自動的に（刻み幅 h をどうするかなどの心配はいらない），“(関数値計算の手間の定数倍)＊(入力変数の数)” に比例する手間でヘッセ行列を求めることができ，またそのどの要素も数値微分によるものより精度がよかった（単精度計算で，相対誤差が 10^{-5} 以下)．

第二に，グラフ算法による “正確な” ヘッセ行列を用いた減速ニュートン法をいくつかの極値問題に適用し，ヘッセ行列の逆行列を遂次的に “近似” しながら反復計算を繰り返す準ニュートン法と比較した．その結果，グラフ算法を用いたニュートン法による極値問題解法は，勾配ベクトルの誤差評価を行いたい場合（これは，現在，グラフ算法による以外に方法がない)や，時

＊ 現 富士銀ソフトウェアサービス