間をかけても，精度の良い極小値を得たい場合に有効であった．

第三に，“ヘッセ行列×ベクトルの値”を，グラフ算法によって“関数計算”と同程度の手間で求める方法を示し，それをHestenes-Stiefel-Danielの公式に用いた共役勾配法と，従来よく用いられているヘッセ行列を用いないFletcher-Reevesの公式を用いた共役勾配法とを比較した．その結果，グラフ算法を用いたHSD法は，今回とりあげたすべての方法の中で，収束性と得られた解の精度の点で最も成績がよかった．

以上，グラフ算法によって2階偏導関数値つまりヘッセ行列が良い精度で自動的に計算できることと，それをニュートン法と共役勾配法において用いることの有効性を確認した．この様に，ヘッセ行列などめんどうな微係数計算が含まれているが故に埋れていた種々の方法に，グラフ算法を応用することは非常に価値あることと思われる．

グラフ算法を使いやすい実用的なものとし，その応用範囲を広げるためには，与えられた方程式系から計算グラフを自動的に作り出す“方程式系→計算グラフの自動生成”(大規模な方程式系の計算グラフを構成することはかなり大変である)と，“計算時間の短縮”とが不可欠であり，今後の重要な課題である．

非線形方程式系の解法に対する高速微分法の応用

統計数理研究所　土　谷　　隆
東京ガス　笹　山　晋　一

高速微分法は，関数の計算過程を計算グラフとして表現し，計算グラフ上の最短路問題を解くことにより，その微係数や丸め誤差評価値を効率よく求める算法である．それによると，スカラー関数の勾配や関数値の丸め誤差が，関数値を計算するのと同程度の手間で求められ，ベクトル関数のJacobi行列(やその転置)と定数ベクトルの積も関数値を計算するのと同程度の手間で得られる．この算法の非線形方程式系 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})=0$ の解法への応用については伊理 他(1985)があるが，ここではそれに関連した3つの事柄について報告する．

(1)　Newton法の線形方程式の新しい解法について

Newton法によって非線形方程式系を解くには，近似解 $\hat{\boldsymbol{x}}$ の修正量 $\Delta\hat{\boldsymbol{x}}$ を求めるために，そのJacobi行列 J を係数とする線形方程式 $J\Delta\boldsymbol{x}=-\boldsymbol{f}$ を解くことが必要となる．伊理 他(1985)では，そのために，まず(i) Jacobi行列を求め，その上で(ii)線形方程式 $J\Delta\boldsymbol{x}=-\boldsymbol{f}$ をLU分解によって解く，という方法が使われている．一方，(ii)を行う際に共役勾配法を使い，算法中に現れる“Jacobi行列(やその転置)とベクトルの積”を高速微分法によって直接求めれば，“方程式系の関数値を入力変数の個数回計算する”のと同じ程度の手間で，しかもJacobi行列を直接求めずに，線形方程式を解いて修正量を求めることができる．ここでは，100元程度の2つの例題について，LU分解による方法と共役勾配法による方法の計算時間を比較して，問題によっては後者が速いことを確かめた．

(2)　丸め誤差による反復停止条件の見直しについて

反復法で方程式を解く際，“得られた近似解 $\hat{\boldsymbol{x}}$ において各関数値がその丸め誤差程度の大きさになっている”ことが合理的な反復停止条件として考えられ，高速微分法による丸め誤差推定値を使うと，この条件が成立することを確認した上で反復を停止できる[1]．ところが，反復解

$\hat{\boldsymbol{x}}$ が"収束"し，そこでの関数値の丸め誤差の推定値も正しいのに，上の条件を満たさないことがある．これは，$\hat{\boldsymbol{x}}$ を求める際に $\hat{\boldsymbol{x}}$ 自身に混入する丸め誤差の関数値への影響が大きいためで，"反復法では各関数値は（"$\hat{\boldsymbol{x}}$ に混入する丸め誤差のその関数値への影響値"＋"その関数値の $\hat{\boldsymbol{x}}$ での丸め誤差"）程度までしか減少しない"ことが分かった．

(3)　近似解の精度推定について

Newton法では新しい近似解 $\hat{\boldsymbol{x}}_N$ は古い近似解 $\hat{\boldsymbol{x}}_O$ を使って $\hat{\boldsymbol{x}}_N=\hat{\boldsymbol{x}}_O-J^{-1}\boldsymbol{f}(\hat{\boldsymbol{x}}_O)$ と表現できる．そこで，$\hat{\boldsymbol{x}}_N$ を $\hat{\boldsymbol{x}}_O$ の関数と見なし，関数 $\hat{\boldsymbol{x}}_N(\hat{\boldsymbol{x}}_O)$ に対して高速微分法を適用すれば，その丸め誤差（即ち，解の精度）が求められる．特に，J^{-1} の計算が関数計算よりも高精度で行われ，J^{-1} の計算過程において発生する誤差が無視できるような場合，この計算は，Jacobi行列の転置とベクトルの積を求める高速微分法を使うと，$\boldsymbol{f}$ の丸め誤差を求めるのと同程度の手間で行うことができる．この方法を伊理 他（1985）で取り扱った108元非線形連立方程式に適用したところ，解の精度をほぼ厳密に評価することができた．

参　考　文　献

1)　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.

合成関数の高速微分法とその適用例

千葉大学工学部　小野令美・戸田英雄

$\boldsymbol{x}$ の関数 $\boldsymbol{f}$ が与えられたとき，$\boldsymbol{f}$ の値と同時に正確な $(\partial\boldsymbol{f}/\partial\boldsymbol{x})$ の値を求める効率のよい手法が提案されたが［Iri (1984)］，この手法を $(\partial\boldsymbol{f}/\partial\boldsymbol{x})$ とある列ベクトル $\boldsymbol{y}$ の積を求める計算に適用する．その特殊な場合として $\boldsymbol{x}$ が t の関数のとき，合成関数 $\boldsymbol{F}(t)=\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}(t))$ の t に関する導関数 $d\boldsymbol{F}/dt$ が求められる［伊理ら（1986）］．さらに同じ考え方で $d^2\boldsymbol{F}/dt^2, \cdots, d^k\boldsymbol{F}/dt^k$ も求めることができる．それらの手法について述べる．

$(\partial\boldsymbol{f}/\partial\boldsymbol{x})\boldsymbol{y}$ の計算の手間は多く見積もっても $\boldsymbol{x}$ から $\boldsymbol{f}$ を求める計算過程を単項あるいは2項演算に分解したとき（この分解で現われる各項を中間変数という），1回の掛け算に要する手間の，（中間変数の個数）×(2～3) 倍程度である．

次に，このようにして求められる微係数を，Runge-Kutta系の常微分方程式数値解法公式に利用したものの性質を一般的に論じ，新しい3段6次公式と3段7次公式を与える．常微分方程式 $d\boldsymbol{x}/dt=\boldsymbol{f}(t,\boldsymbol{x})$ の場合は，上記の合成関数の場合の $d\boldsymbol{x}/dt$ が今計算している $\boldsymbol{f}$ そのものであるという特殊な場合と考えられるので，この微分法が適用できる．さらに偏微分係数をRunge-Kutta系の極限公式［戸田（1980），小野（1986）］に現われる形で用いることにより前述の次数が達成される．これは $d\boldsymbol{x}/dt$ の値ではないが，算法の初期設定を少し変えるだけで全く同様に求められる．

$\boldsymbol{f}$ の導関数を用いる常微分方程式の数値解法としてはTaylor級数法が考えられるが，ここに与える公式は，t と $\boldsymbol{x}$ から $\boldsymbol{f}$ を求める手続きだけが与えられているという前提に立てば，達成可能な次数の観点から手間の面で有利な公式といえる．