

強単調な非線形方程式に対するホモトピー法の事前評価

中央大学理工学部 牧野光則 (Mitsunori Makino)

1 はじめに

ホモトピー法は解が自明な補助方程式から目的の非線形方程式に連続的に方程式の変形を行い、曲線となる解を追跡することにより目的の方程式の解を得る数値解析アルゴリズムである [1] - [8]. ホモトピー法では、緩い条件の下で補助方程式 (自明解) を任意に選べ、解への収束が理論上保証されている。しかし、数値計算の立場から見ると解曲線を確実に追跡できるかという問題は完全ではない。また、解曲線の振舞いを事前に解析することが一般には困難であるので、計算量等の見積りが困難である。著者らはこれまでに簡易ニュートン法の収束定理である占部型の定理 [9] に着目し、これを利用してホモトピー法の収束性を補完する手法を提案した [10]。また、非線形強単調方程式等を対象に、ホモトピー法が必ず成功し、かつ計算量の上限が事前評価できる条件及び評価式について提案した [11] - [14]。さらに、この際に得られるホモトピー方程式の近似解を利用して、解曲線の存在範囲を評価する手法について報告した [15]。

本稿では、強単調な有限次元非線形方程式を対象として、ホモトピー法の成功の保証、計算量・解曲線の振舞い等の事前評価について報告する。

2 解曲線追跡アルゴリズム

本稿では、以下の有限次元非線形方程式

$$f(x) = 0, \quad f: \bar{D} \subset \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n, \quad (1)$$

について考える。但し、 D は空でない有界開集合、 \bar{D} は D の閉包、 0 は f の正則値、 $x \in \bar{D}$ で f は C^2 級とする。ここで、 f の微分 Df は α_f -Lipschitz 連続、すなわち $x_1, x_2 \in \bar{D}$ で

$$\|Df(x_1) - Df(x_2)\| \leq \alpha_f \|x_1 - x_2\|, \quad (2)$$

とし、さらに、 f は強単調、すなわち $x_1, x_2 \in \bar{D}$ で

$$\langle f(x_1) - f(x_2), x_1 - x_2 \rangle \geq C_f \|x_1 - x_2\|^2 \quad (3)$$

を満たすとする。

式 (1) の解を求めるために、初期点 $x^0 \in D$ に対してニュートンホモトピー方程式

$$h(x, t) = f(x) - (1-t)f(x^0) = 0, \quad h: \bar{D} \times [0, 1] \rightarrow \mathbf{R}^n, \quad (4)$$

を構成する。 $0 \in \mathbf{R}^n$ を h の正則値とすると、式 (4) の解は一般に曲線となる。式 (2), (3) より $t \in [0, 1]$ を固定すると、 h の x に関する微分 $D_x h$ は α_f -Lipschitz 連続、かつ、 h は $x \in \bar{D}$ に関して強単調

$$\langle h(x_1, t) - h(x_2, t), x_1 - x_2 \rangle \geq C_f \|x_1 - x_2\|^2, \quad \forall x_1, x_2 \in \bar{D} \quad (5)$$

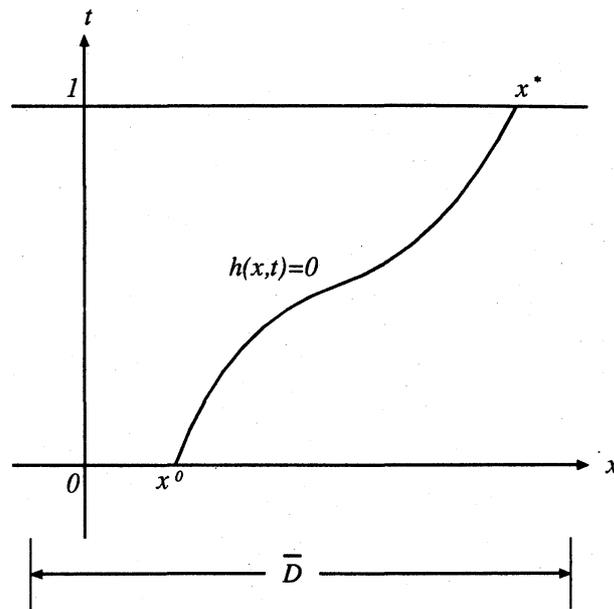


図 1: ホモトピー方程式 (4) の解曲線

を満たす. 従って, 式 (4) は各 $t \in [0, 1]$ において複数解をもたず, 解曲線は自明解 $(x^0, 0)$ から $t = 0$ 超平面を出発し, 再び $t = 0$ に戻らない (図 1).

この解曲線を以下のアルゴリズムにより $(x^0, 0)$ から追跡し, 式 (1) の解を求めることを考える:

アルゴリズム 2.1 [13], [15] (図 2)

Step 1 与えられた t の刻み幅 $\Delta t > 0$ に対して

$$t_i = \begin{cases} i\Delta t, & i = 0, \dots, m, \\ 1, & i = m+1, \end{cases} \quad m = \text{ceil}\left(\frac{1}{\Delta t}\right) - 1, \quad (6)$$

とする. 但し, $\text{ceil}(y)$ は y より小さくない最小の整数である. 更に, 誤差の上界 $\beta > 0$ が与えられているとする.

Step 2 $i = 0, x_{t_i} = x^0$ とする.

Step 3 反復 (逐次近似)

$$x_{t_{i+1}, k+1} = x_{t_{i+1}, k} - D_x h(x_{t_i}, t_{i+1})^{-1} h(x_{t_{i+1}, k}, t_{i+1}), \quad (7)$$

を次式が満たされるまで行う. 但し, $x_{t_{i+1}, 0} = x_{t_i}, k = 0, 1, \dots$ とする:

$$\|h(x_{t_{i+1}, k+1}, t_{i+1})\| \leq \beta. \quad (8)$$

Step 4 $x_{t_{i+1}} = x_{t_{i+1}, k+1}$ とする. $i < m$ ならば $i = i+1$ とし, Step 3 へ. $i = m$ ならば終了. \square

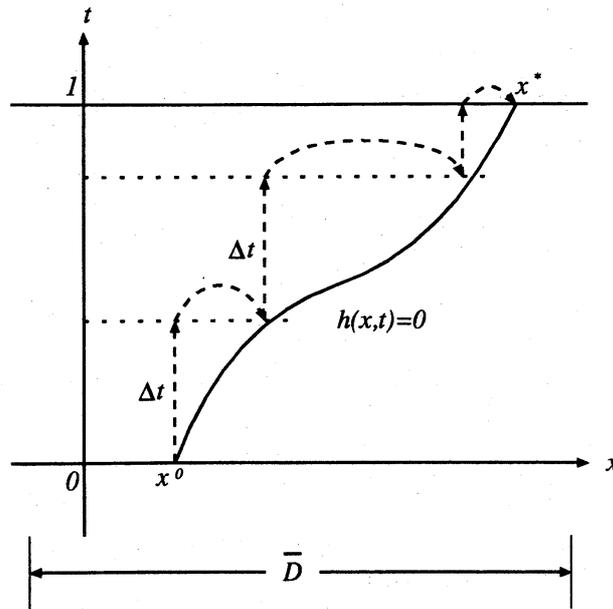


図 2: アルゴリズム 2.1 の概念

アルゴリズム 2.1 により, $t=1$ におけるホモトピー方程式 (4) の解 $(x^*, 1)$ が求められる. ホモトピーの定義より, x^* は目的の方程式 (1) の解であるので, アルゴリズム 2.1 による式 (1) の求解が可能であることが示される.

しかし, これまでの議論では Δt 及び β の与え方が決められていない. これらを任意に定めれば, アルゴリズム 2.1 において反復式 (7) が収束するとは限らない. 従って, アルゴリズム 2.1 が必ず終了すること, すなわち非線形方程式 (1) の解が必ず求められる保証が与えられていないことに注意する.

3 計算量と解曲線の存在範囲の事前評価

アルゴリズム 2.1 が成功する保証は全ての t_i で式 (7), すなわち簡易ニュートン反復が必ず停止することを示すことで与えられる. このとき, Δt を小さく設定すればそれだけ多数の解曲線途中における近似解 (x_{t_i}, t_i) を求めることになり, 解曲線に関する情報がより多く得られることになる. しかし, このとき m は増大するので, 総反復回数 $\kappa(m+1)$ の増大を考慮する必要がある.

ここで簡易ニュートン法の収束条件を与える占部型の定理 [9] を導入する. 占部型の定理は $f(x) = 0$ の近似解 x_0 と定数 δ に対して

- (1) x_0 の δ -近傍に解が唯一存在すること
- (2) x_0 を初期点にして簡易ニュートン法が必ず成功 (収束) し, 誤差評価ができること

を保証する条件を与えるものである. 作用素の Lipschitz 性を考慮すると占部型の定理は以下のように変形できる [10], [13]:

定理 3.1 [13] X, Y を Banach 空間, $U \subset X$ を空でない開集合, $F: U \rightarrow Y$ は C^1 級の非線形作用素, F の Fréchet 導関数 F' は α -Lipschitz 連続とする. 方程式 $F(x) = 0$ の近似解 $x_0 \in U$ が与えられ, 定数 $\delta > 0$ が以下の条件を満たすとする:

1.

$$B(x_0; \delta) \subset U. \quad (9)$$

但し, $B(x_0; \delta)$ は中心 x_0 , 半径 δ の閉球である.

2. x_0 における F の微分 $F'(x_0)$ の逆作用素 $F'(x_0)^{-1} : Y \rightarrow X$ が存在して

$$\|F'(x_0)^{-1}F(x_0)\| + \frac{1}{2}\|F'(x_0)^{-1}\|\alpha\delta^2 \leq \delta, \quad (10)$$

及び

$$\|F'(x_0)^{-1}\|\alpha\delta < 1, \quad (11)$$

を満たす.

このとき, 以下が成立する:

1. $B(x_0; \delta)$ 内に $F(x) = 0$ の解 x^* が唯一存在する.

2. 簡易ニュートン反復

$$x_{k+1} = x_k - F'(x_0)^{-1}F(x_k), \quad k = 0, 1, \dots, \quad (12)$$

で得られる近似解の列 $\{x_k\}$ に対し $x_k \in B(x_0; \delta)$ が成立し, $k \rightarrow \infty$ のとき $x_k \rightarrow x^*$ となる.

3.

$$\|x_k - x^*\| \leq \frac{\|F'(x_0)^{-1}F(x_k)\|}{1 - \|F'(x_0)^{-1}\|\alpha\delta}. \quad (13)$$

4.

$$\|x_k - x^*\| \leq \frac{(\|F'(x_0)^{-1}\|\alpha\delta)^k}{1 - \|F'(x_0)^{-1}\|\alpha\delta} \|F'(x_0)^{-1}F(x_0)\|. \quad (14)$$

5.

$$\|F(x_k)\| \leq (\|F'(x_0)^{-1}\|\alpha\delta)^k \|F(x_0)\|. \quad (15)$$

□

この定理 3.1 をアルゴリズム 2.1 に適用することを考える. 本稿で考えている作用素は Lipschitz 性及び単調性を有していることを考慮すると, 定理 3.1 より以下の結果が得られる:

定理 3.2 [13], [15] アルゴリズム 2.1 において, Δt , β , \bar{D} が以下の条件を満たすとす:

1.

$$0 < \Delta t < \frac{C_f^2 - 2\alpha_f\beta}{2\alpha_f\|f(x^0)\|}, \quad (16)$$

2.

$$\beta < \frac{C_f^2}{2\alpha_f}, \quad (17)$$

3.

$$\bar{D} \supset \left\{ x \mid \|x - x^0\| \leq \bar{\delta} + \frac{\beta + \|f(x^0)\|}{C_f} \right\}, \quad (18)$$

4.

$$\bar{\delta} = \frac{C_f - \sqrt{C_f^2 - 2\alpha_f(\beta + \Delta t\|f(x^0)\|)}}{\alpha_f} \quad (19)$$

このとき以下が成立する：

1. (アルゴリズムの終了保証) アルゴリズム 2.1は必ず成功し、

$$\|f(x_{t=1})\| \leq \beta \quad (20)$$

を満たす式 (1) の解 $x_{t=1}$ が計算可能.

2. (反復回数の上限の事前評価) 式 (7) の反復回数の上界 κ が

$$\kappa = \text{ceil} \left(\frac{\log \frac{\beta}{\beta + \Delta t\|f(x^0)\|}}{\log \frac{\alpha_f \bar{\delta}}{C_f}} \right) \quad (21)$$

で事前評価可能.

3. (解曲線の存在する領域の事前評価) $\|x_i^* - x_{t_i}\|$ の上界 r は次式で事前評価可能：

$$r = \frac{C_f - \sqrt{C_f^2 - 2\alpha_f \left(\beta + \frac{1}{2} \Delta t\|f(x^0)\| \right)}}{\alpha_f} \quad (22)$$

但し, $t \in [0, 1]$, $i = 0, 1, \dots, m+1$. □

ここで定理 3.2 にパラメータ p , q ($0 < p < 1$, $0 < q < 1$) を導入することにより以下が得られる：

定理 3.3 アルゴリズム 2.1において, Δt , β , \bar{D} が次式を満たしていると仮定する：

$$\beta = \frac{C_f^2}{2\alpha_f} p, \quad (23)$$

$$\Delta t = \frac{C_f^2}{2\alpha_f\|f(x^0)\|} (1-p)q, \quad (24)$$

$$\bar{D} \supseteq \left\{ x \mid \|x - x^0\| \leq \frac{C_f}{2\alpha_f} \left(p + 2 - 2\sqrt{(1-p)(1-q)} \right) + \frac{\|f(x^0)\|}{C_f} \right\}. \quad (25)$$

但し, $0 < p < 1$, $0 < q < 1$ とする. このとき, 以下が成立する：

1. アルゴリズム 2.1は有限時間で必ず成功 (終了) し, $\|f(x_{t=1})\| \leq \beta$ なる式 (1) の近似解 $x_{t=1}$ が求められ, 各 t_i において式 (7) の反復回数の上界 κ 及び総反復回数の上界 $\kappa(m+1)$ はそれぞれ次式で事前評価できる：

$$\kappa = \text{ceil} \left(\frac{\log \frac{p}{p + (1-p)q}}{\log \left(1 - \sqrt{(1-p)(1-q)} \right)} \right), \quad (26)$$

$$\kappa(m+1) = \text{ceil} \left(\frac{\log \frac{p}{p + (1-p)q}}{\log \left(1 - \sqrt{(1-p)(1-q)} \right)} \right) \text{ceil} \left(\frac{2\alpha_f\|f(x^0)\|}{C_f^2(1-p)q} \right). \quad (27)$$

2. 解曲線の存在範囲の上界 $\infty > r \geq \max \|x_i^* - x_{t_i}\|, i = 0, \dots, m+1$ は次式で事前評価できる:

$$r = \frac{C_f}{\alpha_f} \left(1 - \sqrt{(1-p) \left(1 - \frac{1}{2}q \right)} \right). \quad (28)$$

□

定理 3.3 より, 反復回数の上界 κ は β と Δt の相対的な大きさを決定するパラメータ p, q のみにより定められることがわかる. すなわち, κ は初期値 x^0 , Lipschitz 定数 α_f, C_f に依存しない. また, 解曲線の存在領域の大きさの事前評価値 r は初期値 x^0 によらないことがわかる.

4 例題

定理 3.3 を用いた簡単な例題として,

$$f(x) = \tan^{-1}(x+2) + \frac{1}{2}x + 1, \quad f: \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}, \quad (29)$$

を考える (3).

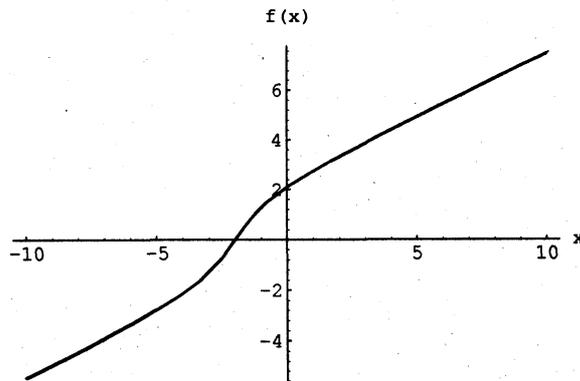


図 3: 例題 (方程式 (29))

この方程式 (29) に対して簡易ニュートン法のみで解を求める場合, 解 ($x = -2$) より離れた箇所を反復の初期値とすると収束しない.

式 (29) より,

$$\alpha_f = \frac{3}{2}, \quad (30)$$

$$C_f = \frac{1}{2}, \quad (31)$$

$$\|f(x^0)\| = \tan^{-1} 2 + 1, \quad (\approx 2.10715) \quad (32)$$

と設定する。このとき、ニュートンホモトピーは

$$\begin{aligned} h(x, t) &= f(x) - (1-t)f(x^0) \\ &= \tan^{-1}(x+2) + \frac{1}{2}x + t - (1-t)\tan^{-1}2, \end{aligned} \quad (33)$$

と構成される。

定理 3.3 より, β , Δt は

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{C_f^2}{2\alpha_f} p \\ &= \frac{p}{12} \end{aligned} \quad (34)$$

$$\begin{aligned} \Delta t &= \frac{C_f^2}{2\alpha_f \|f(x^0)\|} (1-p)q \\ &= \frac{(1-p)q}{12(\tan^{-1}2 + 1)} \quad (\approx \frac{(1-p)q}{25}) \end{aligned} \quad (35)$$

と表される。このとき, 式 (26), (27) より, p , q に対する反復回数及び総反復回数の上界は図 4 のように表される。

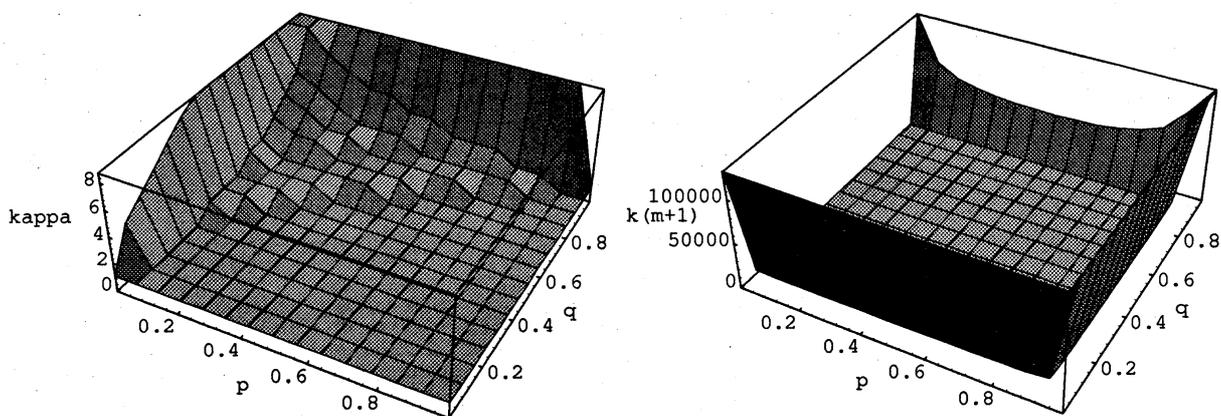


図 4: 反復回数の上界 κ 及び総反復回数の上界 $\kappa(m+1)$

直観的には, p は反復打ち切り値 β の大きさを, q はホモトピーの刻幅 Δt を制御しているパラメータである。従って, p を大きくまたは q を小さくすれば反復回数の上界 κ が小さくなることは理解できるであろう。図 4 を見れば, 広い範囲で $\kappa = 1$ となっている。すなわち, 式 (29) のような簡単な問題に対しては, アルゴリズム 2.1 において各 t_i での簡易ニュートン反復 (7) は 1 回で終了すること

がわかる。しかし、 p , q の取り方によってはステップ数 m が増大し、総反復回数の上界 $\kappa(m+1)$ が莫大になる。

事前評価の立場から見ると、問題の次元 n に注意してアルゴリズムの計算量を最小にする p , q を設定することが望ましい。例題のような1次元 ($n=1$)の問題の場合には、 $\kappa(m+1)$ を最小にする p , q を選べば良い。一方、多次元 ($n>1$)の場合には、簡易ニュートン反復(7)におけるヤコビ行列の逆行列 $D_x h(x_{t_i}, t_{i+1})^{-1}$ の計算量 ($O(n^3)$)に注意する必要がある。この逆行列はアルゴリズム中合計 $(m+1)$ 回計算される。従って、高次元の場合ほど κ が多少大きくなろうとも m が小さくなるように p , q を設定することが必要と考えられる。

5 むすび

本稿では、唯一解をもつ非線形方程式をニュートンホモトピーを利用して解く際の、計算量の上界及びホモトピー方程式の解曲線の存在範囲の上界の事前評価式を示した。この中で、各 t_i における反復回数の上界が Δt と β の相対的な大きさのみで決定されること、領域の上界がホモトピー法の初期点 x^0 によらないこと等が示された。

本稿で述べた手法は事前評価の立場からの十分条件であり、反復回数等の上界を示している。従って、実際に解いた際に要した反復回数(事後評価値)は κ より小さいか等しい。事前評価値と事後評価値との差は対象の問題の非線形性と、事前評価に必要な α_f , C_f の与え方に大きく依存していることに注意する必要がある。

謝辞

日頃御議論頂く早稲田大学大石進一教授、柏木雅英助手に感謝致します。

参考文献

- [1] Garcia, C.B. and Zangwill, W.I.: "Pathways to Solutions, Fixed Points and Equilibria", Prentice-Hall (1981).
- [2] Ohtsuki, T., Fujisawa, T. and Kumagai, S.: "Existence theorems and a solution algorithms for piecewise-linear resistor networks", SIAM J. Math. Anal., **8**, 1, pp. 69-99 (Feb., 1977).
- [3] Ushida, A. and Chua, L.O.: "Tracing solution curves of nonlinear equations with sharp turning points", Int. J. Cir. Theor. Appl., **12**, 1, pp. 1-21 (Jan., 1984).
- [4] Allgower, E.L. and Georg, K.: "Numerical Continuation Methods", Springer-Verlag (1990).
- [5] Makino, M. and Oishi S.: "A homotopy method for numerically solving infinite dimensional convex optimization problems", Trans. IEICE, **E72**, 12, pp. 1307-1316 (Dec., 1989).
- [6] 牧野光則, 大石進一: "無限次元非線形システムの構成的解析法—ホモトピー法の無限次元への拡張—", 信学論 (A), **J73-A**, 3, pp. 470-477 (1990年3月).
- [7] 山村清隆, 久保浩之, 堀内和夫: "不動点ホモトピーを用いた非線形抵抗回路の大域的求解法", 信学論 (A), **J70-A**, 10, pp. 1430-1438 (1987年10月).
- [8] 久保浩之, 山村清隆, 大石進一, 堀内和夫: "不動点ホモトピーを用いた非線形抵抗回路の大域的求解法—トポロジカル定式化による解析—", 信学論 (A), **J71-A**, 5, pp. 1139-1146 (1988年5月).

- [9] Urabe, M.: "Galerkin's procedure for nonlinear periodic systems", *Arch.Rat.Mech.Anal.*, **20**, pp.120-152(1965).
- [10] Makino, M., Oishi, S., Kashiwagi, M. and Horiuchi, K.: "An Urabe type a posteriori stopping criterion and a globally convergent property of the simplicial approximate homoeopy method", *IEICE Trans.*, **E74**, 6, pp. 1440-1446 (June 1991)
- [11] Makino, M., Oishi, S., Kashiwagi, M. and Horiuchi, K.: "Computational complexity of calculating solutions for a certain class of uniquely solvable nonlinear equation by homotopy method", *Trans. IEICE*, **E73**, 12, pp. 1940-1947 (Dec., 1990).
- [12] 牧野光則, 大石進一, 柏木雅英, 堀内和夫: "非線形強単調抵抗回路方程式のホモトピー法による求解の計算量の上界", *信学論 (A)*, **J74-A**, 8, pp. 1151-1159 (1991年8月); see also, Makino, M., Oishi, S., Kashiwagi, M. and Horiuchi, K.: "Computational complexity of the homotopy method for calculating solutions of strongly monotone resistive circuit equations", *Electronics and Communications in Japan, part 3*, **74**, 11, pp. 90-100 (Nov., 1991).
- [13] Makino M., Kashiwagi, M., Oishi, S. and Horiuchi, K.: "A sufficient condition of a priori estimation for computational complexity of the homotopy method", *IEICE Trans. Fundamentals*, **E76-A**, 5, pp. 786-794 (May, 1993).
- [14] Makino, M., Kashiwagi, M., Oishi, S. and Horiuchi, K.: "A priori estimation for computational complexity of homotopy method for calculating solutions of strongly motonone equations", *Proc. NOLTA'93*, pp.1053-1056 (Dec., 1993).
- [15] Makino, M., Kashiwagi, M., Oishi, S. and Horiuchi, K.: "An estimation method of region guaranteeing existence of a solution path in Newton type homotopy method", *IEICE Trans. Fundamentals*, **E76-A**, 7, pp.1113-1116 (July, 1993).