

ホモトピー法の実用化に関する二、三の話題

— 理論が実用になるまで —

群馬大学工学部情報工学科 山村清隆 (Kiyotaka Yamamura)

本報告では、ホモトピー法の実用化に関する最近の話題を二つ紹介する。一つは企業との共同研究による LSI (大規模集積回路網) 設計での実用化に関する話題、もう一つは高分子化学の研究者との共同研究に関する話題で、いずれもそれぞれの分野に大きなブレークスルーを与えている。数値解析の分野における産学協同ならびに他分野との共同研究の一例として御参考になれば幸いである。

以下、前者の資料として、電子情報通信学会誌 1998 年 1 月号掲載予定の拙文「理論が実用になるまで」を示す。この内容は 1997 年 3 月に関西大学で開催された電子情報通信学会総合大会パネル討論「ポスト SPICE シミュレータ」での講演内容をベースとする⁽¹⁾。なお紙面の都合により、高分子化学の分野との共同研究については本稿では省略する。詳しくは文献 (26)~(28) を参照されたい。

若輩ゆえの思い込みや視野の狭さが随所に入ることを最初にお詫び申し上げます。

1. はじめに

大学で理論的な研究に取り組んでいる若い研究者の中には、いつか自分の理論を実用に結び付けたいと考えている方も多いただろう。また企業で技術的な困難に直面し、そのブレークスルーとなるような新しいアイデアを大学の理論研究に求めている方も多いと思う。しかし、理論と実用の間にはしばしば大きなギャップが存在する。理論的に優れたものが実用に結び付くとは限らないし、かといって理論なしの対症療法だけでは画期的な新技術を産み出すことは不可能である。いかにして優れた理論を実用に結び付けるかが、科学技術における重要な課題となる。

筆者の専門は非線形システムの数値解析で、LSI 設計などに応用できる新しい数値解法の開発に主として理論面から取り組んでいる。この分野も、理論と実用の間に大きなギャップの存在する世界である。このような世界では、理論を実用に結び付ける架け橋が重要な役割を果たす。

本稿では、理論が実用に結び付いた事例とそのときのエピソードを筆者が接してきた範囲で紹介し、あわせて大学の理論派の研究者の立場から、理論が実用になるための要件について私見を述べさせて頂く⁽¹⁾。

2. ホモトピー法

私事で恐縮だが、10年前に群馬大学に着任したとき、地元の日立製作所と三洋電機のLSI工場があったことは非常に好運であった。日立製作所のDA開発部および中央研究所の方々からは4年間にわたる技術懇談会を通じて様々な刺激を受け、研究の価値観を設計者の立場に向けることができるようになった。また三洋電機CAD技術部部長の井上靖秋氏とはホモトピー法の実用化に関する非常にエキサイティングな共同研究を行うことができた。ここではホモトピー法の実用化に関連した話題を紹介させて頂く。

LSI設計では、回路シミュレーション、すなわち回路を記述する非線形方程式をコンピュータで解くことが重要な課題となる。回路シミュレーションのためのプログラムを回路シミュレータといい、現在ではSPICE（スパイス）と呼ばれるシミュレータが世界中の設計現場で採用されている。

SPICEでは非線形方程式を解くのに、ニュートン法と呼ばれる数値解法を使っている。しかし非線形方程式の解を求めることは、例えていうと巨大な暗闇の迷路の中でかすかな光を放つ宝物（解）を捜すようなもので、実際には極めて難しい問題である。宝物がすぐ近くにあれば（初期値が解の近くにあれば）、その宝物を拾いあげることができる（ニュートン法は解に収束する）が、すぐ近くにない場合、全くの手探り状態となり、やみくもに進んでも迷路の壁に頭をぶつけて痛い思いをするだけである。このようなニュートン法の非収束問題は回路シミュレーションにおける重大なボトルネックとして多くの設計者を悩ませていた。

ニュートン法の非収束問題を理論面・実用面から解決したのがホモトピー法である。ホモトピー法の詳しい内容については文献(2)を参照して頂きたいが、直観的に言うと、宝物の所まで伸びているロープを手でたぐりながら、暗闇の迷路の中を着実に進んでいく方法である。そのようなロープはホモトピー関数と呼ばれる関数を定義することにより得られる。しかしこのとき関数を不適切に選ぶと偽のロープをつかまされ、同じ所をぐるぐる回ったり、無限の暗闇の中に吸い込まれていくことになる。従ってホモトピー法ではホモトピー関数を選ぶ段階での理論的考察が決定的に重要であり、またそのロープが宝物に通じていることを前もって証明する（大域的収束性を証明するという）ことが必要となる。

筆者は大学院時代に堀内和夫教授、大石進一教授（当時助手）¹の御指導のもとでホモトピー法の研究に着手した。最初は余り実用を意識しない基礎的な研究を行っていたが、堀内教授からのアドバイスにより、次第に実用化されるところまでやりたいという意識が強くなっていった。その結果、助手時代に混合方程式と呼ばれる回路方程式に対してホモト

¹両教授ともホモトピー法に関する多数の論文を発表されている。

ピー法の大域的収束性を証明した論文を書いた^{(3)~(5)}。この研究のベースとなったのが一般化 Katzenelson 法の収束性を証明した早稲田大学・大附辰夫教授 (発表当時 日本電気)、大阪大学・藤沢俊男教授、熊谷貞俊教授の文献 (6) である。

文献 (3)~(5) は後に井上靖秋氏の研究の種子となったらしいが、この時点ではまだ理論だけの論文で、計算効率に関しては何も考えていなかった。その後、混合方程式のもつ特殊な性質を活用することにより、大域的収束性と計算効率の両方に優れた方法を提案した⁽⁷⁾。この方法は理論的には非常に優れた性質をもつが、実用化されることはなかった。その主な理由は実現容易性の欠如にあったようだ⁽⁸⁾。企業の設計者に使って頂くためには、完璧なソフトウェアパッケージを作るか、設計現場で簡単に実現できる (例えば SPICE のプログラムのわずかな修正で実現できる) 実現容易性の高い方法を考える必要があった²。

3. ホモトピー法の実用化に向けて

ソフトウェアの作成は能力的に無理なので、その後は実現容易性という価値観を取り入れた研究を行った。その結果生まれたのが球面法である⁽¹⁵⁾。この方法は非線形回路解析の分野で数々の先駆的な業績をあげられた徳島大学・牛田明夫教授の後退差分公式⁽¹⁶⁾を幾何学的に解釈することにより生まれたもので⁽¹⁷⁾、文献 (7) の方法と比べると SPICE のプログラムのわずかな修正で簡単に実現できるという利点があり、実用化に適していた。この方法をさらに拡張したアルゴリズムが、井上靖秋氏により三洋電機の SPICE に組み込まれることになる。

三洋電機の井上靖秋氏とは文献 (3)~(5) をきっかけに知り合い、しばしば群馬大学でホモトピー法に関するディスカッションを行っていた。いわゆる、私的なレベルでの産学協同である。お互いの価値観の交流から、筆者は企業の設計現場の実情を重視するようになり、井上氏は理論的なものを重視するようになった (お互い毒されてしまった?)。球面法もそのような議論から生まれた成果の一つである。さらに井上氏は、ホモトピー法を三洋電機の SPICE に組み込むにあたり、SPICE で使われている修正節点方程式に対してホモトピー法の大域的収束性が証明できるかどうか、筆者に質問を寄せられた。証明がなければ、ホモトピー法を安心して使うことはできない。ホモトピー法の大域的収束性は混合方程式に対し

²文献 (7) の方法は実用化にはつながらなかったが、その後「すべての解を求めるアルゴリズム」という新しい方向で発展した^{(9)~(14)}。しかしこの分野の方なら容易に想像がつくように、「すべての解を求める」というテーマ自体、およそ実用にたどり着く可能性の低い難しいテーマである。果たして実用化まで進められるかどうか疑問を感じながらも、毎年改良版を発表してきた。最近文献 (13),(14) になってようやく、実用規模の回路 (線形領域数 10^{100} 以上) が解けるようになり、企業の方々にも実用性を認識されるようになった。興味本位・採算度外視の一点集中攻撃も大学の研究者の特権であろう。

ては証明されていたが^{(3)~(7)}, 修正節点方程式に対しては証明されていなかったもので, 井上氏を中心に筆者をアドバイザーとして, 文献(3)~(7)の手法をベースに大域的収束性を証明することになった. かなりの試行錯誤の末, 証明に成功し, 導入した方法が必ず収束するという理論的保証を得ることができた⁽¹⁸⁾. これは理論的にも実用的にも, 非常に画期的な成果であった³.

4. 海外の動向

回路シミュレーションにおけるホモトピー法の実用化に関してはベル研, テキサスインストルメント社を始めとする欧米の企業や研究所でも活発な研究が行われていたが^{(19),(20)}, それらは高々数百素子程度の回路を対象としていた. これに対し三洋電機のホモトピー法は, 最も解析が困難とされるバイポーラアナログ回路に対して, 1万素子クラスのLSI(バイポーラアナログ回路としては最大級)を世界で初めて収束の保証付きで解くことに成功するなど, その解析規模ならびに理論的完成度は欧米の研究をはるかにしのいでいた. この成果は1995年12月にラスベガスで開催された国際シンポジウムのホモトピー法に関するスペシャルセッションで発表され^{(21),(22)}, 欧米の研究者に大きな衝撃を与えた.

同じスペシャルセッションでベル研, カリフォルニア大学バークレー校などからもホモトピー法に関する研究発表が行われたが, 彼らの開発したホモトピー法は修正節点方程式に対してしばしば収束しないことが報告された⁽²³⁾. そのため様々な対症療法を提案していたが, 理論が全くないため, 根本的解決にはならないことが予想された. 彼らの使っているホモトピー関数は不動点ホモトピーと呼ばれるもので, 三洋電機で使われているホモトピー関数(ニュートンホモトピー)とは違うものである. そこで不動点ホモトピーを用いた場合について, 修正節点方程式に対するホモトピー法の大域的収束性を理論的に検討してみた. その結果, 関数のある部分に -1 を付けるだけで大域的収束性を証明できることが判明した⁽²⁴⁾. この -1 を付けないと, たとえ良い初期値を与えても, 半数近くは絶対に収束しないことも分かった. さらに -1 を付けることにより, 高い確率で安定解に収束することも証明できた.

この論文は昨年4月にベル研, バークレー等に送付したが, プログラムのある部分に -1 を付けることにより, ベル研のホモトピー法の収束性は大幅に向上するはずである⁴. なお, どのようにして -1 に気付いたのか国際会議や電子メールなどでよく聞かれるが, これは中央大学の篠田庄司教授から安定解を効率よく求めるアルゴリズムの研究をするようアドバイ

³井上靖秋氏はこれら一連の業績により, 1996年3月に早稲田大学より博士号を授与されている.

⁴その後, -1 を付けることによりすべて収束したとの連絡を頂いた.

スを頂いたお蔭である⁽²⁵⁾。安定性の観点から写像度の理論を展開すると、 -1 の着想に自然とたどり着くのである。

5. むすび

以上、個人的な話ばかりで大変恐縮に感じているが、筆者としては産学協同ならびに理論が実用になるまでの一つのパターンを経験させて頂いたと感じている。特に -1 の話は、学生に理論の重要性を説くときのエピソードとして利用させて頂いている。

回路シミュレーションのように理論と実用の間に大きなギャップの存在する世界では、理論を実用に結び付ける強力な架け橋が必要である。そしてその架け橋は、理論と実用の両側から歩み寄るような形で架けることが重要である。

学会論文誌、研究会資料などには、新しい技術の核となり得る斬新なアイデアがたくさん隠れているように思う。ホモトピー法はそこに複数の架け橋が架けられた好運な例であろう。

謝辞 お世話になった方々に深く御礼申し上げます。

文 献

- (1) 山村清隆, “理論が実用になるまで,” 1997年電子情報通信学会総合大会, パネル討論 “ポスト SPICE シミュレータ” 予稿, no.PA-3-2, March 1997.
- (2) 山村清隆, “非線形現象の解析手法 [V] — 非線形方程式の数値解法 —,” 電子情報通信学会誌, vol.79, no.7, pp.740-745, July 1996.
- (3) 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,” 電子情報通信学会論文誌 (A), vol.J70-A, no.10, pp.1430-1438, Oct. 1987.
- (4) 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 —,” 電子情報通信学会論文誌 (A), vol.J71-A, no.5, pp.1139-1146, May 1988.
- (5) 山村清隆, 堀内和夫, “非線形回路解析におけるホモトピー法の収束性について,” 電子情報通信学会論文誌 (A), vol.J72-A, no.1, pp.156-159, Jan. 1989.
- (6) T. Ohtsuki, T. Fujisawa, and S. Kumagai, “Existence theorems and a solution algorithm for piecewise-linear resistor networks,” SIAM J. Math. Anal., vol.8, no.1, pp.69-99, Feb. 1977.
- (7) K. Yamamura and K. Horiuchi, “A globally and quadratically convergent algorithm for solving nonlinear resistive networks,” IEEE Trans. Comput.-Aided Des. Integrated Circuits Syst., vol.9, no.5, pp.487-499, May 1990.
- (8) 平井千秋, 渡辺俊典, 林晋一, “後退形/前進形両積分法を併用した機能/回路混在系の新シミュレーション手法,” 情報処理学会論文誌, vol.32, no.8, pp.1014-1021, Aug. 1991.

- (9) K. Yamamura and M. Ochiai, "An efficient algorithm for finding all solutions of piecewise-linear resistive circuits," *IEEE Trans. Circuits Syst.-I*, vol.39, no.3, pp. 213–221, March 1992.
- (10) K. Yamamura, "Finding all solutions of piecewise-linear resistive circuits using simple sign tests," *IEEE Trans. Circuits Syst.-I*, vol.40, no.8, pp.546–551, Aug. 1993.
- (11) K. Yamamura and M. Mishina, "An algorithm for finding all solutions of piecewise-linear resistive circuits," *Int. J. Circuit Theory Appl.*, vol.24, no.2, pp.223–231, March 1996.
- (12) K. Yamamura, "An algorithm for representing functions of many variables by superpositions of functions of one variable and addition," *IEEE Trans. Circuits Syst.-I*, vol.43, no.4, pp.338–340, April 1996.
- (13) K. Yamamura, H. Kawata, and A. Tokue, "Interval solution of nonlinear equations using linear programming," *BIT*, vol.38, no.1, pp.188–201, March 1998.
- (14) K. Yamamura and T. Ohshima, "Finding all solutions of piecewise-linear resistive circuits using linear programming," *IEEE Trans. Circuits Syst.-I* 掲載予定.
- (15) K. Yamamura, "Simple algorithms for tracing solution curves," *IEEE Trans. Circuits Syst.-I*, vol.40, no.8, pp.537–541, Aug. 1993.
- (16) A. Ushida and L. O. Chua, "Tracing solution curves of non-linear equations with sharp turning points," *Int. J. Circuit Theory Appl.*, vol.12, no.1, pp.1–21, Jan. 1984.
- (17) 井上靖秋, "予測子修正子法を用いた解曲線追跡アルゴリズムの幾何学的解釈," *電子情報通信学会論文誌 (A)*, vol.J75-A, no.11, pp.1682–1690, Nov. 1992.
- (18) 井上靖秋, "大規模回路の直流動作点解析法," *電子情報通信学会論文誌 (A)*, vol.J77-A, no.3, pp.388–398, March 1994.
- (19) M.-C. Chang, J.-H. Chern, and P. Yang, "Efficient and robust path tracing algorithm for DC convergence problem," *Proc. 1993 IEEE Int. Symp. Circuits Syst.*, Chicago, Illinois, pp.1635–1638, May 1993.
- (20) R. C. Melville, L. Trajković, S. C. Fang, and L. T. Watson, "Artificial parameter homotopy methods for the DC operating point problem," *IEEE Trans. Comput.-Aided Des. Integrated Circuits Syst.*, vol.12, no.6, pp.861–877, June 1993.
- (21) Y. Inoue and K. Yamamura, "Practical algorithms for dc operating-point analysis of large-scale circuits," *Proc. 1995 Int. Symp. Nonlinear Theory and its Applications*, Las Vegas, Nevada, pp.1153–1158, Dec. 1995.
- (22) K. Yamamura, "Spherical methods for tracing solution curves," *Proc. 1995 Int. Symp. Nonlinear Theory and its Applications*, Las Vegas, Nevada, pp.1177–1182, Dec. 1995.
- (23) L. Trajković and W. Mathis, "Parameter embedding methods for finding DC operating points: Formulation and implementation," *Proc. 1995 Int. Symp. Nonlinear Theory and its Applications*, Las Vegas, Nevada, pp.1159–1164, Dec. 1995.
- (24) K. Yamamura, T. Sekiguchi, and Y. Inoue, "A globally convergent algorithm using the fixed-point homotopy for solving modified nodal equations," *Proc. 1996 Int. Symp. Nonlinear Theory and its Applications*, Kochi, pp.463–466, Oct. 1996.

- (25) 篠田庄司, “線形回路と非線形回路,” 電子情報通信学会 75 年史 (創立 75 周年記念出版), 第 3 部 最近 25 年間における電子情報通信技術の発展, pp.249–255, 電子情報通信学会, 1992.
- (26) 大石進一, “精度保証付き数値解析にまつわるできたてほやほやの話,” 信学誌, vol.79, no.7, pp.693–695, July 1996.
- (27) 土橋敏明, “溶液の相平衡と非線形方程式,” 信学誌, vol.80, no.11, pp.1171–1174, Nov. 1997.
- (28) 山村清隆, 土橋敏明, 稲熊雄一, 蓬田幸二, 近藤千夏, “ホモトピー法による高分子溶液の多相平衡の計算,” 信学技報, NLP97-61, pp.51–58, July 1997; 信学論 (A) 掲載予定.