数理解析研究所講究録
928巻 1995年 32-37

有限次元非線形方程式の全解探索アルゴリズム

神沢 雄智† 柏木 雅英‡ 大石 進一†
Yuchi KANZAWA Masahide KASHIWAGI Shin'ichi OISHI
† 早稲田大学 理工学部
School of Science and Engineering, Waseda University
‡ 九州大学 工学部
School of Engineering, Kyushu University

1 はじめに

有限次元非線形方程式

$$f(x) = 0, \quad x \in \boldsymbol{R}^l, \quad f : \boldsymbol{R}^l \to \boldsymbol{R}^n \ (l \geq n) \tag{1}$$

の、ある領域に存在する全ての解を精度保証付で求めることを考える。この方程式の解は、一般に $(l-n)$ 次元多様体として得られ、0次元の場合はMooreが、より高次の場合にはNeumaierがそれぞれ区間解析を用いた全解探索アルゴリズムを提案している。しかし、彼らのアルゴリズムは、有限ステップでアルゴリズムが終了することが保証されていない。そこで、本報告では、Neumaierのアルゴリズムを改良することによって、有限ステップで終了するアルゴリズムが構築されたことを述べる。Mooreのアルゴリズムも同様の改良によって、有限ステップで終了する [3]。

2 準備

本報告で用いられる記号の説明は以下のとおり。

$I(D)$	$D \subset \boldsymbol{R}^n$に属する区間の集合
$\mathrm{mid}(I)$	区間Iの中心
$\mathrm{rad}(I)$	区間Iの半径
$\|I\|$	区間Iの絶対値
$\\|I\\|_u$	$\max\{\|I_i\|/u_i \mid \text{for } \forall i\}$
	$(u > 0 : \text{scaling vector})$
$\\|A\\|_u$	$\\|\|A\|_u\\|_u$

fの計算機上の表現として、f の区間包囲 F の定義を以下に記す。

定義 2.1 (区間包囲，区間拡張) [2] Dを$\boldsymbol{R}^l$の有界開集合する。区間写像 $F : I(D) \to I(Y)$ が $f : D \to Y$ の区間包囲であるとは，

$$F(I) \supset f(I) \text{ for all } I \in I(D) \tag{2}$$

が成立することをいう．また，Fが fの区間拡張であるというのは，Fが fの区間包囲で，

$$F([x, x]) = f(x) \text{ for all } x \in D \tag{3}$$

が成立することをいう． □

Krawczykの区間写像を用いた解多様体の存在定理を以下に記す。

定理 2.1 (Krawczykの写像による解の存在定理)

D_x, D_yをそれぞれ$\boldsymbol{R}^n, \boldsymbol{R}^m$の有界開集合，$I(\bar{D}_x), I(\bar{D}_y)$をそれぞれ$\bar{D}_x, \bar{D}_y$に含まれる区間の集合，$f_{m+n} : \bar{D}_x \times \bar{D}_y \to \boldsymbol{R}^n$を$C^1$級，$\boldsymbol{R}^m, \boldsymbol{R}^n$のノルムを$u > 0$をscaling vectorとするscaled maximum norm，$F_{m+n}, D_xF_{m+n}, D_yF_{m+n}$をそれぞれ $f_{m+n}, D_xf_{m+n}, D_yf_{m+n}$の連続な区間包囲，0を fの正則値とする．また，ある区間 $I_x (\in I(\bar{D}_x) \times I_y \in I(\bar{D}_y))$ について

$$\begin{cases} c_x = \mathrm{mid}(I_x), \\ c_y = \mathrm{mid}(I_y) \end{cases} \tag{4}$$

とし，C_x, C_yをそれぞれ

$$\begin{cases} \mathrm{mid}(C_x) &=& c_x, \\ \mathrm{mid}(C_y) &=& c_y, \end{cases} \tag{5}$$

$$\begin{cases} \mathrm{rad}(C_x) &=& \beta_x \,\mathrm{rad}(I_x) \quad (0 < \beta_x < 1), \\ \mathrm{rad}(C_y) &=& \beta_y \,\mathrm{rad}(I_y) \quad (0 < \beta_y < 1) \end{cases} \tag{6}$$

とする微小区間，区間行列 $M_{x,y}$を

$$M_{x,y} = E - L_{x,y}^{-1} D_x F_{m+n}(I_x, I_y), \tag{7}$$

区間写像 $K_{x,y}$を

$$K_{x,y}(I_x, I_y) = c_x - L_{x,y}^{-1}\{F_{m+n}(C_x, C_y) + D_y F_{m+n}(C_x, I_y)(I_y - c_y)\} + M_{x,y}(I_x - c_x) \tag{8}$$

で定義する．ただし，Eを単位行列，$L_{x,y} \in D_x F_{m+n}(C_x, C_y)$ とする．ここで，

$$\begin{cases} K_{x,y}(I_x, I_y) &\subset& I_x, \\ \|M_{x,y}\|_u &<& 1 \end{cases} \tag{9}$$

が満たされるならば，以下が成立する:

固定された $y \in I_y$について、方程式

$$f(x, y) = 0 \tag{10}$$

の解が I_x内に唯一存在する。 □

Neumaier は、この定理をもとに以下の全解探索アルゴリズムを提案した。

アルゴリズム 2.1 (Neumaier の全解探索アルゴリズム) [2]

Step 1 $I_x \times I_y$を初期区間とする。

Step 2 もし $F_{m+n}(I_x, I_y) \not\ni 0$ ならば区間内に解がないので、捨てる。初期区間を変えて Step 1 へ。そうでなければ次へ。

Step 3 $F_{m+n}(C_x, C_y)$ を計算し、$L_{x,y} \in D_x F_{m+n}(C_x, C_y)$ を選ぶ。もし、L_x^{-1}が存在しなければ Step 7 へ。そうでなければ次へ。

Step 4 もし、$\|M_{x,y}\|_u < 1$ かつ $K_{x,y}(I_x, I_y) \subset I_x$ ならば、固定された $y \in I_y$について，解が I_x内に唯一存在する。区間を変えて Step 1 へ。そうでなければ次へ。

Step 6 区間 $I_x \times I_y$を分割し、それぞれ初期区間とする。Step 1 へ。

□

3 Neumaier のアルゴリズムの改良

区間の境界上に解が存在する場合、アルゴリズム 2.1はその解の存在を判定できずに無限に分割を続ける。それを避けるために、試験区間を膨らませる。膨らませ方は文献 [1] の方法を採用し、中心のニュートン作用素による修正量の 2 倍と、元の区間の半径とを比べ、大きい方を膨らませた区間の半径とする。すなわち、新しい区間の半径を $I'_x \times I_y$として、

$$\varepsilon = |L_{x,y}^{-1}\{f_{m+n}(C_x, C_y) + F'_{m+n}(C_x, I_y)(I_y - c_y)\}| \tag{11}$$

$$I'_x = c_x + [-\varepsilon, \varepsilon] \tag{12}$$

と表される。

また、区間包囲に次の性質を要求する。

定義 3.1 (区間包囲の連続性) [1]

Dを$\boldsymbol{R}^n \times \boldsymbol{R}^m$の有界開集合とし，$I(\bar{D})$を$\bar{D}$に含まれる区間の集合とし，$c$をその中心とする．$f : \bar{D} \to \boldsymbol{R}^n$を連続写像，$F : I(\bar{D}) \to I(\boldsymbol{R}^n)$を$f$の区間包囲とする．また，$\boldsymbol{R}^m, \boldsymbol{R}^n$のノルムを$u > 0$をscaling vectorとするscaled maximum normとする．このとき，点$c \in \bar{D}$において，

$$\begin{aligned}&\|I_k - c\| \to 0 \Rightarrow \|F(I_k) - f(c)\| \to 0,\\ &\qquad \text{for } \{I_k\}\ (I_k \in I(\bar{D}), \mathrm{rad}(I_k) \neq 0)\end{aligned} \tag{13}$$

すなわち，全ての$\varepsilon > 0$に対してある$\delta > 0$が存在して

$$\mathrm{rad}(I) \neq 0, \|I - c\| < \delta \Rightarrow \|F(I) - f(c)\| < \varepsilon \tag{14}$$

とできるとき，fの区間包囲Fはcで連続であるという．また，全ての$c \in \bar{D}$で連続であるとき，$\bar{D}$で連続であるという． □

定義 3.2 (区間包囲の一様連続性)

Dを$\boldsymbol{R}^n \times \boldsymbol{R}^m$の有界開集合とし，$I(\bar{D})$を$\bar{D}$に含まれる区間の集合とし，$c$をその中心とする．$f : \bar{D} \to \boldsymbol{R}^n$を連続写像，$F : I(\bar{D}) \to I(\boldsymbol{R}^n)$を$f$の区間包囲とする．また，$\boldsymbol{R}^m, \boldsymbol{R}^n$のノルムを$u > 0$をscaling vectorとするscaled maximum normとする．このとき，全ての点$c \in \bar{D}$において，任意の$\varepsilon > 0$に対してcに依らないある$\delta > 0$が存在して

$$\mathrm{rad}(I) \neq 0, \|I - c\| < \delta \Rightarrow \|F(I) - f(c)\| < \varepsilon \tag{15}$$

とできるとき，fの区間包囲Fは$\bar{D}$で一様連続であるという． □

これらの性質を満たす区間包囲は、入力する区間の半径が小さければ小さいほど，出力される区間の半径も小さくなるような性質を持ったものである．ここで、閉区間のみを入力の対象とする連続な区間包囲はまた、一様連続な区間包囲になることが筆者によって示されている [3]。さらに、計算機上に実現される区間包囲は通常、連続な区間包囲であることから、これらの性質を要求することは決して厳しいことではないことに注意されたい。

次に、“分割” という手続きが次の仮定を満たすとする。

仮定 3.1 $I_{\mathrm{bis}(k)}$を、初期区間Iをk回分割したときにできる区間の集合とする。このとき、$I_{\mathrm{bis}(k)}$について次の性質が成り立つものとする。

$$\max\{\mathrm{rad}(I) \mid I \in I_{\mathrm{bis}(k)}\} \to 0 \quad (k \to \infty), \tag{16}$$

□

我々が通常考える分割がこの仮定を満たしていることに注意すれば、先に述べた区間包囲の連続性と合わせ、次の性質が成り立つことが分かる。

$$\bigcup_{I \in I_{\mathrm{bis}(k)}} F(I) \to f(I) \quad (k \to \infty). \tag{17}$$

一方、解が$m\ (> 0)$次元多様体となることに注意すると、$D_x F_{m+n}(x^*, y^*) = 0$なる解$(x^*, y^*)$が存在することが分かる。このような点を中心にとる区間にNeumaierのアルゴリズム 2.1を適用することはできない (L^{-1}が存在しない)。そこで、L^{-1}が存在するように、xのいくつかの要素とyのいくつかの要素を交換することを考える。実際、L^{-1}が存在するような要素交換が少なくとも一つ存在して、Krawczykの写像を構成することができることが筆者によって示されている [3]。

以上の改良によって新しいアルゴリズムを以下に示す。

アルゴリズム 3.1 (全解探索精度保証アルゴリズム)

D_x, D_yをそれぞれ$\boldsymbol{R}^n, \boldsymbol{R}^m$の有界開集合，$I(\bar{D}_x), I(\bar{D}_y)$をそれぞれ$\bar{D}_x, \bar{D}_y$に含まれる区間の集合，$f : \bar{D}_x \times \bar{D}_y \to \boldsymbol{R}^n$を$C^1$級，0を$f$の正則値，$\boldsymbol{R}^m, \boldsymbol{R}^n$のノルムを$u > 0$をscaling vectorとするscaled maximum norm,

F, D_xF, D_yFをそれぞれ f, D_xf, D_yfの単調連続な区間包囲とする．また，ある区間 $I_x(\in I(\bar{D}_x))\times I_y(\in I(\bar{D}_y))$ について

$$\begin{cases} c_x &= \mathrm{mid}(I_x), \\ c_y &= \mathrm{mid}(I_y) \end{cases} \tag{18}$$

とし，C_x, C_yをそれぞれ

$$\begin{cases} \mathrm{mid}(C_x) &= c_x, \\ \mathrm{mid}(C_y) &= c_y, \end{cases} \tag{19}$$

$$\begin{cases} \mathrm{rad}(C_x) &= \beta_x\,\mathrm{rad}(I_x) \quad (0<\beta_x<1), \\ \mathrm{rad}(C_y) &= \beta_y\,\mathrm{rad}(I_y) \quad (0<\beta_y<1) \end{cases} \tag{20}$$

とする微小区間, $\rho > 1$(定数) とする．

1. 対象とする区間を $I_x \times I_y$とする．
2. $F(I_x, I_y) \not\ni 0$ か?　YES ならば，解無し．対象とする区間を変え 1. へ．NO ならば次へ．
3. 定義域 $X \times Y : \boldsymbol{R}^{m+n}$を，$\|D_x^{-1}\|$ が最小となるように成分の選び換えを行なう．改めて$\boldsymbol{R}^m$と$\boldsymbol{R}^n$に分ける．次へ．
4. $F(C_x, C_y), D_xF(C_x, C_y)$ を計算し，$L \in D_xF(C_x, C_y)$ を選ぶ．L^{-1}が存在するか?　YES ならば，次へ．NO ならば，7. へ．
5.
$$\varepsilon_I = \rho\|L^{-1}\{F(C_x, C_y) + D_yF(C_x, I_y)(I_y - c_y)\}\|_u, \tag{21}$$
$$I'_x = [-\varepsilon_I u, \varepsilon_I u] + c_x \tag{22}$$
とする．$I'_x \leftarrow I'_x \cup I_x$として次へ．
6. $\|M\| < 1$ かつ $K(I_x, I_y) \subset I_x$か?　YES ならば，任意の $y \in I_y$に対し唯一解 $x \in I_x$が存在し，終了，対象とする区間を変え 1. へ．NO ならば次へ．
7. $I_x \times I_y$を (仮定 3.1を満たすように) 区間分割し，生成された区間 I_a, I_bを $I_x \times I_y$として 1. へ．

□

このアルゴリズムによって、ある初期区間内のすべての解を特定することが有限ステップで可能であることが、筆者によって示されている [3]。その概要は、次のようである。まず、解の存在しない領域が、解の非存在条件によって有限ステップで特定できることを示した。次に、唯一の孤立解のみ存在する区間の半径が十分小さければ、解の存在条件によってその存在を判定できることを示した。ここで、次のような仮想アルゴリズムを考えた。

アルゴリズム 3.2

1. 全解の存在を判定したい初期区間を何回か分割する。このとき分割されたすべての区間が、一つの解も含まないか、唯一の孤立解のみを含みながら解の存在条件を満たす程にその区間の半径が小さいかのいずれかになるようにする。
2. その後、分割されたすべての区間に対して解の存在条件と解の非存在条件を確かめる。

□

この仮想アルゴリズムが初期区間内の全解特定して有限ステップで終了することは、すぐわかる。もちろん、この仮想アルゴリズムのステップは実現不可能である。しかし、アルゴリズムは、解が存在する区間をステップの分割によって、仮想アルゴリズムのステップの条件を満たすようにする。したがって、アルゴリズムもまた有限ステップで終了することが示されるわけである。

4 数値例

本報告で提案されたアルゴリズムを計算機上で実現し、以下の簡単な問題を解いた。

例 4.1 方程式

$$\begin{cases} {x_0}^2 + {x^2}_1 + (x_2 - 2)^2 - 16 &= 0, \\ {x^2}_0 + {x^2}_1 + (x_2 + 2)^2 - 16 &= 0 \end{cases} \tag{23}$$

の全解探索を領域 $(x_0, x_1, x_2) \in ([-4,4],[-4,4],[-4,4])$ 内で実行した。結果は図 1のようになり、実行時間は

```
runtime of cpu is ~897.6666666666666
```

であった。 □

5 おわりに

本報告は、Neumaier の全解探索アルゴリズムを改良し、その改良されたアルゴリズムが有限ステップで終了することを示した。なお、Moore のアルゴリズムも、本報告とほぼ同様の改良によって、有限ステップで終了することも示されている。

参考文献

[1] Kashiwagi, M. and Oishi, S.: "Krawczyk-Based Numerical Validation Using Rational Arithmetic" IEICE Trans. Fundamentals, Vol.J77-A, N0.10, pp.1372-1382 (in Japanese),(1994-10).

[2] Neumaier A.: Interval methods for systems of equations, CAMBRIDGE UNIVERSITY PRESS(1990).

[3] Kanzawa, Y., Kashiwagi, M, Oishi, S., Nakamura, H. and Horiuchi, K.: "An Algorithm for Enclosing All Solutions of Nonlinear Equations", (to be accepted).

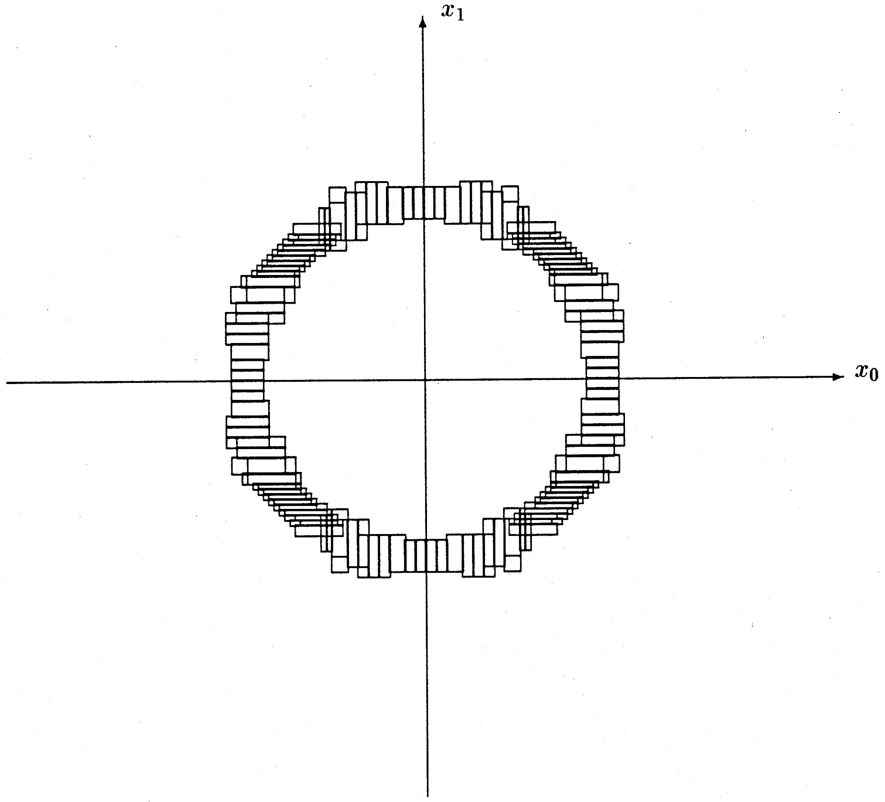

図 1: 例題の全解を包み込んだ 328 個の区間