

多変数連立非線形方程式の根の自動探索法 (δ 関数法)

渡辺二太, * 赤尾英毅

文部省核融合科学研究所, (株)*日本電気

An Automatic Roots Finding Method for Systems of Equations Based
on
Numerical Integration of the δ Function

Tsuguhiro WATANABE and * Hideki AKAO

National Institute for Fusion Science and *NEC

概要

The purpose of this paper is to study the algorithm for all solutions to nonlinear systems of equations $H(X) = 0$ within a given compact domain $D \in \mathbf{R}^n$ based on the numerical integration of the δ function (δ function method). The δ function method is proved to include the numerical algorithm based on the Cauchy integration theorem for the case of root finding problem of an analytic function of 1 complex variable.

1. 序

多変数連立方程式

$$0 = h_i(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (1)$$

の全ての解を見いだす問題をここでは考える。

多変数の連立非線形方程式であっても高い精度で近似解が見つかるならば、ニュートン法で高精度解を求めるのは、一般的には、容易である [1]. 非線形方程式には解の個数とか、解の存在領域を特定することのできる一般的規則は存在しない。しかしながら解を探索する領域 (空間) の広がりについては、物理的理由等から多くの場合限定可能である。よって、あらかじめ設定された空間 (解探索空間) 内に存在するすべての解 (近似解) を手際よく見つける自動計算手続きには広い応用がある。もし、解くべき非線形方程式が解探索空間内に可算無限個の解を持つような場合には指定した分解能の範囲内で全ての解を見いだすことで実用上は満足できる。

非線形方程式の解を探索する方法の一つとしてホモトピー法がある [2, 3]. ホモトピー法は、解が既知の方程式を援用し未知の解を探索する方法であり、球面法と名付けられた解曲線追跡法と組み合わせられ、非線形回路解析、あるいは混合溶液の多相平衡解析等に適用されている。ホモトピー法は非対称行列の固有値問題の数値解法にも応用され、解曲線の分岐現象 (2 個の実固有値から 1 組の複素共役固有値への遷移) の構造等を明らかにしている [6]. しかしながら、ホモトピー法は必ずしも全ての解を見つけたすと保証されてはおらず、また、初期

値 (既知解) の選び方によって得られる解の個数も異なる場合が多いとされている [2]. またホモトピー法は解が得られても, それが当初に意図した領域内に位置していることも保証されない.

非線形方程式の全ての解を求める手法として区間解析を用いたアルゴリズムが研究されている. 解探索領域を限定し, クラフチック関数 (区間関数) を導入し, 解がその領域に存在するかどうかを検査する [4]. 平均値の定理に基礎を置くアルゴリズムである.

ここでは数値積分に基礎をおく非線形方程式の近似解探索のアルゴリズムを考えよう [5]. 解探索領域内に位置する任意の領域 Ω に対して

$$I \equiv \int_{\Omega} \Lambda[h_1, h_2, \dots, h_n] dx_1 dx_2 \dots dx_n = \begin{cases} 1 & \text{方程式 (1) の解が } \Omega \text{ 内に存在するとき} \\ 0 & \text{それ以外} \end{cases} \quad (2)$$

の関係をもつ関数 Λ の数値積分で解の存在を判定する. この特質は代表的超関数の一つである δ 関数 [8] の特質そのものである. δ 関数の具体的表示は次のようになる.

$$\delta(x_1, x_2) = \frac{1}{2\pi} \nabla^2 \ln r, \quad 2 \text{次元の場合} \quad (3)$$

$$\delta(x_1, \dots, x_n) = -\frac{1}{(n-2)\Omega_n} \nabla^2 \frac{1}{r^{n-2}}, \quad n(\geq 3) \text{次元の場合} \quad (4)$$

但し, n 次元空間における単位球の表面積 Ω_n と微分演算子 ∇^2 , 距離 r は次式で定義されている.

$$\Omega_n = \begin{cases} \frac{(2\pi)^{n/2}}{(n-2)!!} & \text{if } n \text{ is even.} \\ \frac{2(2\pi)^{(n-1)/2}}{(n-2)!!} & \text{if } n \text{ is odd.} \end{cases} \quad (5)$$

$$\nabla^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \right)^2, \quad r = \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right)^{1/2}. \quad (6)$$

δ 関数法の特徴は解探索領域を厳密に指定することが可能な点にあり, この手法の実用性は数値積分の簡潔さが最大の鍵となる.

第2節においては, δ 関数法とも密接な関係にある Cauchy の積分定理を用いて1複素変数の解析関数のゼロ点を自動探索する方法を述べる. 解くべき領域を正方格子網で覆い, 単位正方格子点上の関数値 (4格子点) のみを使って数値積分する (4点積分法). これにより, 注目正方格子内にゼロ点が存在するかどうかの判定が可能となる. 第3節においては2実変数の連立非線形方程式の近似解を δ 関数の数値積分で自動探索する方法を述べ, この方法は第2節の Cauchy の積分定理を用いる方法を内包していることも示す. 第4節は n 実変数の連立非線形方程式の近似解を δ 関数の数値積分で自動探索する方法を述べ, プログラミング上の要点についても記す. 第5節はまとめて当てられる.

2. Cauchy の積分定理を用いた解析関数のゼロ点自動探査法

解くべき方程式が1複素変数 ω の解析関数で $D(\omega) = 0$ と記述されているならば特性 (2) を有する積分関係式は Cauchy の積分定理で与えられる.

$$I \equiv \frac{1}{2\pi i} \int_{\Omega} \frac{D'(\omega)}{D(\omega)} d\omega = \begin{cases} 1 & D(\omega) \text{ のゼロ点が一つ } \Omega \text{ 内に存在するとき} \\ 0 & D(\omega) \text{ のゼロ点, 極等が } \Omega \text{ 内に存在しないとき} \end{cases} \quad (7)$$

この性質を利用すれば, 1 複素変数の解析関数 $D(\omega)$ の零点を自動探索するための手続きが組み立てられる (Cauchy 積分の高速実行法: 4 点積分法). 端点が存在しない積分 (7) は台形公式で数値積分し, 微分は

$$D'(\omega)d\omega = dD(\omega) \quad (8)$$

の関係で差分に置き換える. 解探索の具体的手続きは次のようになる.

- (1) 複素 ω 面における解探索領域に正方格子網を設定し全格子点上の $D(\omega)$ の値を計算する.
- (2) 全ての単位正方格子について

$$I = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{D'(\omega)}{D(\omega)} d\omega$$

を, 隣接する格子点 ($\omega_i, i = 0, 1, 2, 3$) の関数値を用いて数値的に計算する.

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{D'(\omega)}{D(\omega)} d\omega \simeq \frac{2}{2\pi i} \sum_{i=0,3} \left[\frac{D(\omega_{i+1}) - D(\omega_i)}{D(\omega_{i+1}) + D(\omega_i)} \right] \equiv I, \quad (\omega_4 = \omega_0) \quad (9)$$

- (3) $\Re I \geq 4/5\pi$ のときに注目している単位正方格子内に $D(\omega) = 0$ の根が存在すると判定し, 単位正方格子の中央点を近似根とする.
- (4) 得られた近似根群を初期値としてニュートン法で正確な根群を求める. ニュートン法で収束した解が当初設定した領域外 (正方格子網外) に位置したとき, あるいは, 根の重要度を判定し低重要度ものは捨てる.

上記計算手続きが妥当であることを確認しよう. $D(\omega)$ を根 ω_r の近傍でテーラ展開し 4 点積分法を実行する (以下では $\omega_0 = 0, \omega_1 = 1, \omega_2 = 1 + i, \omega_3 = i$ とおく).

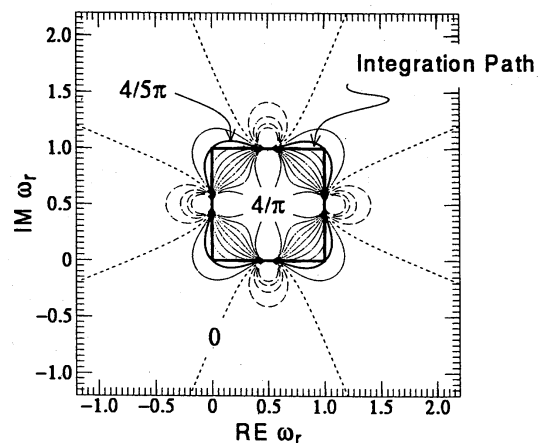
$$D(\omega) \simeq D'(\omega_r)(\omega - \omega_r) \quad (10)$$

このときは,

$$I = \frac{4/\pi}{1 - 16(\omega_r - 1/2 - i/2)^4} \quad (11)$$

となる. 等高線図 Fig.1 が示しているように, 積分路の内側に $D(\omega) = 0$ の根が存在するときは, $\Re I \geq 4/5\pi$ の関係が成立している. また, 積分路外に $D(\omega) = 0$ の根が存在するときは (11) が示すように, 格子間隔の 4 乗に逆比例して急速に I への寄与は減少する. さらに, $\Re I = 4/5\pi$ の曲線は, 等高線図 Fig.1 が示しているように, 積分路 (単位正方格子) とほぼ重複しているので根探索の手続きに無駄を生じない.

Fig.1 Cauchy 積分定理 (7) の 4 点数値積分法による計算結果. 横軸, 縦軸は格子間隔で規格化された根の実部と虚部とを示す. $D(\omega)$ の具体的表式は式 (10), 等高線は積分値の実部を示している.



Cauchy の積分定理を 4 点数値積分法で実行する根探索手続きはプラズマ中の各種分散関係式 $D(\omega) = 0$ の解を計算するために利用され、その実用性を確認した。

3. δ 関数を利用する根の自動探索法-2 変数の場合

ここでは、 δ 関数法の具体的手順を簡明に示すため 2 実変数 (x, y) の連立非線型方程式

$$\begin{cases} 0 = G(x, y) \\ 0 = H(x, y) \end{cases} \quad (12)$$

の解の近似値を求める δ 関数法を述べよう。根の存在, 不存在を示す積分関係式

$$I = \int_{\Omega} \delta(G, H) dG dH = \begin{cases} 1 & (G=0, H=0) \subset \Omega \\ 0 & \text{それ以外} \end{cases} \quad (13)$$

は 2 次元空間の δ 関数の具体的表式

$$\delta(G, H) = \frac{1}{2\pi} \nabla^2 \ln \sqrt{G^2 + H^2} \quad (14)$$

を用いると、前節で述べた Cauchy の積分定理を利用する方法を内包していることが直ちに示される。すなわち、解くべき方程式と変数が、

$$x = \omega_r, y = \omega_i, G = D_r(\omega), H = D_i(\omega) \quad (15)$$

と与えられているときは、

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{2\pi} \iint_{\Omega} dG dH \left(\frac{\partial^2}{\partial H^2} + \frac{\partial^2}{\partial G^2} \right) \ln \sqrt{G^2 + H^2} \\ &= \frac{1}{2\pi} \left[- \oint_C dG \frac{H}{G^2 + H^2} + \oint_C dH \frac{G}{G^2 + H^2} \right] \\ &= \frac{1}{2\pi} \oint_C dD \frac{D_r - iD_i}{(D_r + iD_i)(D_r - iD_i)} \\ &= \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{dD}{D} \end{aligned}$$

となるからである (C は Ω の外周)。

一般の非線形方程式 (12) を解くには、解探索領域を (x, y) の正方格子に分割し、各格子点上の関数値 $H(x, y), G(x, y)$ を計算する。探索には、積分変数を (G, H) から (x, y) へ変換する。

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{2\pi} \iint_{\Omega} dG dH \left(\frac{\partial^2}{\partial H^2} + \frac{\partial^2}{\partial G^2} \right) \ln \sqrt{G^2 + H^2} \\ &= \frac{1}{2\pi} \iint_{\Omega} dx dy \frac{\partial(G, H)}{(x, y)} \left(\frac{\partial^2}{\partial H^2} + \frac{\partial^2}{\partial G^2} \right) \ln \sqrt{G^2 + H^2} \\ &= \frac{1}{2\pi} \iint_{\Omega} dx dy \left[\frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} G/r^2 & G_y \\ H/r^2 & H_y \end{pmatrix} + \frac{\partial}{\partial y} \begin{pmatrix} G_x & G/r^2 \\ H_x & H/r^2 \end{pmatrix} \right] \end{aligned}$$

これにより、体積積分を表面積分に変換する事ができ、それを台形則で数値積分を実行すれば、次のようになる(4点積分値表式)。

$$I = \frac{1}{4\pi} \left[\frac{G_{00}(H_{10} - H_{01}) + (G_{01} - G_{10})H_{00}}{r_{00}^2} + \frac{-G_{01}(H_{11} - H_{00}) + (G_{11} - G_{00})H_{01}}{r_{01}^2} \right. \\ \left. + \frac{G_{10}(H_{11} - H_{00}) - (G_{11} - G_{00})H_{10}}{r_{10}^2} + \frac{-G_{11}(H_{10} - H_{01}) - (G_{01} - G_{10})H_{11}}{r_{11}^2} \right]$$

ここで、 $G_{ij}, H_{ij}, (i, j = 0, 1)$ は隣接する4隅の関数値である ($r^2 = G^2 + H^2$)。この表式が根の存在、不存在を示す指標となっていることを確認しよう。解を定める曲線 $G(x, y) = 0$, $H(x, y) = 0$ の (x, y) 面での交叉する状況と積分値 I の関係を確認するため、関数 G, H を根 (x_r, y_r) の周りで展開しよう。

$$G(x, y) = a(x - x_r) + b(y - y_r)$$

$$H(x, y) = c(x - x_r) + d(y - y_r)$$

積分領域は $(0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1)$ で与えられているとする。係数 (a, b, c, d) に数値を設定し I の等高線図を描くと、次のようなことが導かれる。

- 積分領域外に存在する解の影響は積分中心から解までの格子点数の -4 乗に比例して小さくなる。
- 曲線が斜交しているときは、積分領域中心に解が存在しても、4点積分値は小さくなる。
- $\partial H/\partial x, \partial H/\partial y, \partial G/\partial x, \partial G/\partial y$ 等の値に極端な不釣り合いがある時は積分領域中心に解が存在しているときでも、4点積分値は小さくなる。
- 曲線 $F(x, y) = 0, G(x, y) = 0$ の交叉状況により I の値は正にも負にもなる。すなわち、根の存在は積分値 I の絶対値で判定すべきである。

よって、解くべき方程式および変数には適切なスケールリングをあらかじめ施しておくのが肝要である。根存在の判定基準の一例は次のようになる。

$$\begin{cases} |I| \geq 0.01 & \text{積分領域内に根が存在すると判定} \\ |I| < 0.01 & \text{積分領域内に根は不存在と判定} \end{cases}$$

4. δ 関数を利用する根の自動探索法-n 変数の場合

ここでは、変数の個数が n 個の場合について δ 関数法の要点を取りまとめよう。 n 次元空間の δ 関数の表式 (4) を解の存在を評価する積分関係式 (2) の関数 Λ に代入する。

$$I = -\frac{1}{(n-2)\Omega_n} \int dh_1 dh_2 \cdots dh_n \left(\sum_{i=1}^n \frac{\partial^2}{\partial h_i^2} \right) \frac{1}{r^{n-2}} \quad (16)$$

$$= -\frac{1}{(n-2)\Omega_n} \int dx_1 dx_2 \cdots dx_n \frac{\partial(h_1, h_2, \dots, h_n)}{\partial(x_1, x_2, \dots, x_n)} \left(\sum_{i=1}^n \frac{\partial^2}{\partial h_i^2} \right) \frac{1}{r^{n-2}} \\ = \frac{1}{\Omega_n} \int dx_1 dx_2 \cdots dx_n \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \begin{pmatrix} h_{1,1} & \cdots & h_{1,i-1} & \frac{h_1}{r^n} & h_{1,i+1} & \cdots & h_{1,n} \\ h_{2,1} & \cdots & h_{2,i-1} & \frac{h_2}{r^n} & h_{2,i+1} & \cdots & h_{2,n} \\ \cdots & & \cdots & & \cdots & & \cdots \\ h_{n,1} & \cdots & h_{n,i-1} & \frac{h_n}{r^n} & h_{n,i+1} & \cdots & h_{n,n} \end{pmatrix} \quad (17)$$

ここで, $r, h_{i,j}$ は次式で定義されている.

$$r = \sqrt{\sum_{i=1}^n h_i(x_1, x_2, \dots, x_n)^2}, \quad h_{i,j} = \frac{\partial}{\partial x_j} h_i(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

部分積分を解析的に実行し体積積分を表面積分に変換する. 微分を差分に置き換え, 表面積分は台形公式で実行する.

n 次元立方格子の一つの表面を構成している頂点は 2^{n-1} 個存在する. これらの頂点の関数値で上記積分値が記述されているが, 台形則で積分すること, 微分は差分に置き換えていることから導かれる特質を利用すれば計算の項数を半減できる. $A_j, B_j, (j = 1, \dots, n), S$ は, 長さ n のベクトルで,

$$S = A_1 + B_1 = A_2 + B_2 = \dots = A_{i-1} + B_{i-1} = A_{i+1} + B_{i+1} = \dots = A_n + B_n \quad (18)$$

の関係が成立するときは,

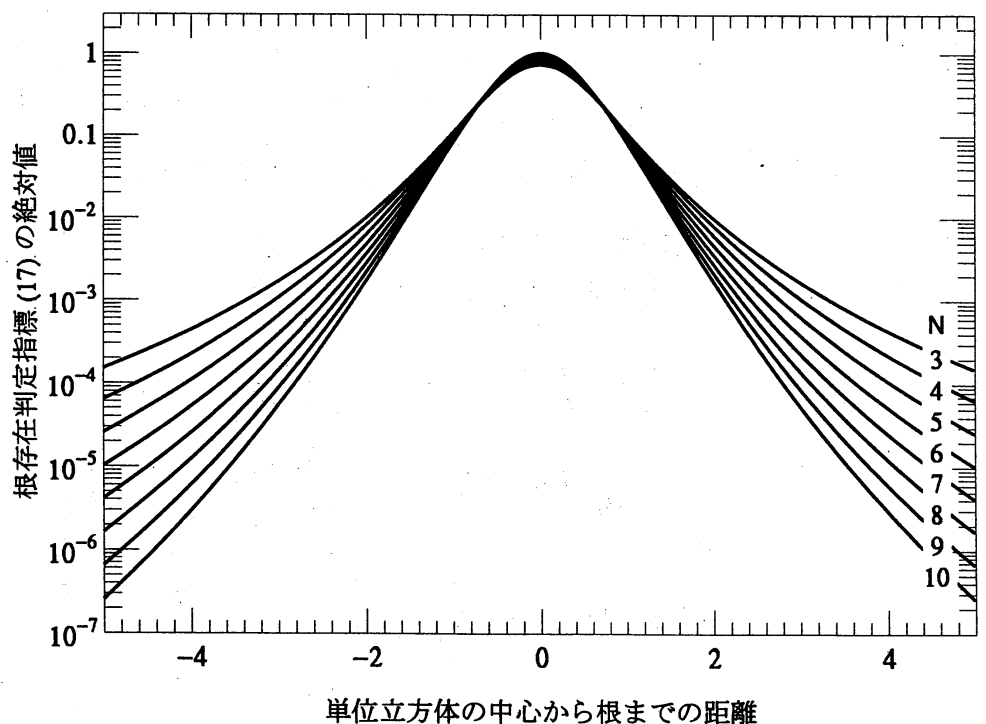
$$\begin{aligned} I' &\equiv \det[A_1 - B_1, A_2 - B_2, \dots, A_{i-1} - B_{i-1}, S, A_{i+1} - B_{i+1}, \dots, A_n - B_n] \\ &= 2^{n-1} \det[A_1, A_2, \dots, A_{i-1}, B_{i+1}, A_{i+1}, \dots, A_n] \end{aligned}$$

の関係が成立する. ただし上記のままでは行列式の値を計算する途中で差分に相当する打ち消し合いが生ずるので, 隣接する列ベクトルの差を使って行列値を計算する.

$$I' = 2^{n-1} \det[A_1 - A_2, A_2 - A_3, \dots, A_{i-1} - B_{i+1}, B_{i+1}, A_{i+1} - A_{i+2}, \dots, A_n - A_1] \quad (19)$$

この方針で作成されたプログラムを使って積分値 (17) を指標とする解探索の妥当性を確かめよう. n 次元空間の極座標表示を使って n 本の互いに直交するベクトルを構成する. このベクトルに直交する平面で n 個の解曲面を構成し解の位置を積分する立方格子の中心から遠ざけていく. このときの積分値 (17) の推移を Fig.2 に示す.

Fig.2 根の存在を自動探索するための指標 (17) の高速数値積分結果. 横軸は単位立方格子の中心と方程式の解までの距離 (格子間隔で規格化). 縦軸は, 単位立方格子の頂点の関数値のみを使って計算された指標 (17) の絶対値. 連立方程式は互いに直交する N 個の平面で記述.



解の所在を示す指標として積分値 (17) は十分に機能することが確認できる。よって、一般の n 変数の場合でも第 3 節に述べた 2 変数の場合と同様な手続きで非線形方程式の解探索が可能である。

数値計算例 (5 変数の場合) を次に示そう。

$$M = 100(y - x^2)^2 + (1 - x)^2 + 90(u - z^2)^2 + (1 - z)^2 + 10.1((y - 1)^2 + (u - 1)^2) + 19.8(y - 1)(u - 1) + 10(\cos(v) - x + y)^2$$

の極大点, 極小点, 停留点を当手法で求める。解くべき方程式は次のようになる。

$$\begin{aligned} 0 &= -2(1 - x) - 20(\cos(v) - x + y) - 400x(-x^2 + y) \\ 0 &= 19.8(-1 + u) + 20.2(-1 + y) + 20(\cos(v) - x + y) + 200(-x^2 + y) \\ 0 &= -2(1 - z) - 360z(u - z^2) \\ 0 &= 20.2(-1 + u) + 19.8(-1 + y) + 180(u - z^2) \\ 0 &= -20(\cos(v) - x + y) \sin(v) \end{aligned}$$

非線形最適化法の教科書 [9] によれば 4 変数の場合 (v の項が存在しないとき) でも, 解の探索は手ごわいとされている。計算結果 (解の近似値を δ 関数法で求め, ニュートン法で確定した数値) は次のようになる。

x	y	z	u	v
1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.5708
0.46096	0.32938	1.2827	1.6464	3.1416
0.62815	0.33532	-1.2459	1.5623	2.1852×10^{-27}
1.45262	2.1331	0.24429	4.2494×10^2	3.1416
1.1476	1.2687	-8.1585×10^{-2}	8.0307×10^{-2}	4.1831×10^{-18}

計算で得られた解の中から任意の 3 点を選び出し, その 3 点を通る平面上で M の等高線表示を行うことで得られた解の妥当性を確認した。

5. まとめと討論

根探索領域と, 分解能を指定したときに, 全ての根の近似値を高い信頼度のもとで見いだすことが当研究の目標である。この目標に沿い,

- Cauchy の積分定理を用いた解析関数のゼロ点自動探索法を述べ, その有用性を確かめた。
- δ 関数を用いた, 非線型方程式の根の自動探索法を提案した。2 実変数の連立非線形方程式に対する方法は, 上記を包含していることを示した。
- δ 関数を用いた, n 変数非線型連立方程式の根の自動探索法の原理を提案しプログラムを作成した。
- 5 変数非線型連立方程式の数値計算で当手法の有効性を確認した。

当手法 (δ 関数法) は 1 実変数の非線形方程式を解く問題に適用すれば 2 分法に帰着されることを指摘しておこう。1 変数のときは階段関数の微分が δ 関数となるので,

$$\delta(h) = \frac{d\theta(h)}{dh}, \quad \theta(h) = \begin{cases} 1/2 & h > 0 \text{ のとき} \\ -1/2 & h < 0 \text{ のとき} \end{cases} \quad (20)$$

の関係式が成立する。よって根の存在を示す積分 (2) は,

$$\begin{aligned}
 I &= \int dh \delta(h) \\
 &= \int_{x_0}^{x_1} dx \frac{dh}{dx} \frac{d\theta(h)}{dh} \\
 &= \frac{\theta(h(x_1)) - \theta(h(x_0))}{2} \\
 &= \begin{cases} \pm 1 & h(x_0), h(x_1) \text{ が異符号のとき} \\ 0 & h(x_0), h(x_1) \text{ が同符号のとき} \end{cases}
 \end{aligned}$$

となり, 2分法における根探索の手続きと同一の判定基準を与えている。

根探索領域を正方格子網で覆う当手法は並列計算が可能であることも特長の一つである。また, 微係数を必要としないので解くべき方程式の形状に制約は無く, 適用範囲が広い。

6変数以上になると解探索領域を一律の正方格子網で覆う方法は計算時間の観点から相当困難になると思われる。たとえば, 各変数について一律に20等分するだけで, 格子点の個数は $(20+1)^6 = 85,766,121$ となる。変数の個数が6を越えるような多変数連立非線形方程式を解く場合, あるいは変数の個数が少なくても, 関数計算に計算時間がかかるような場合を解くためには, 粗い格子と細かい格子を使い分ける工夫で効率向上を図る必要があるかもしれない。

参考文献

- [1] 山本哲朗他, 特集 ニュートン法の新しい登場, 数理科学, 8月号, (1981).
- [2] 山村清隆, 非線形現象の解析手法 [V], 電子情報通信学会誌, 79, 740-745, (1996).
- [3] 土橋敏明, 溶液の相平衡と非線形方程式, 電子情報通信学会誌, 80, 1171-1174, (1997).
- [4] 大石進一, 非線形現象の解析手法 [I], 電子情報通信学会誌, 79, 162-168, (1996).
- [5] 渡辺二太, 赤尾英毅, 連立非線形方程式の根の自動探索法 (超関数法), 統計数理研究所共同研究レポート 85 (MHD 数理モデルによる核融合計算と最適設計) 129-135 (1996).
- [6] 鈴木智博, ホモトピー法を適用した実数非対称行列の固有値問題, 日本応用数理学会論文誌, 7, 353-362, (1997).
- [7] H.Ratschek and J.Rokne, New Computer Method for Global Optimization, (Ellis Horwood Limite, 1988).
- [8] 超関数論入門 II, グリファンド, シーロフ著, 功力金二郎, 井関清志, 麦林布道訳 (共立全書 529, 共立出版 (昭和 39 年)) 391 頁.
- [9] 非線型最適化問題の反復解法, ジャコビ, コワリク, ビゾ著, 関根智明訳 (培風館, (昭和 51 年)), 26 頁.