解説

非線形方程式の全解探索について†

神澤 雄智*

1 はじめに

有限次元非線形方程式

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

の全ての解を求めることは様々な分野において重要な問題となる。例えば、本文例4.1では電子回路の動作点を、ある範囲で全て精度保証付きで求めている。

本解説では、精度保証付き数値計算の技術を用いて、ある超直方体 $T \in \mathbf{R}^n$ における方程式(1)の全ての解を求める方法、いわゆる、全解探索アルゴリズムについて述べる。

はじめに基本原理を述べ、基本原理にしたがった Moore の方法を述べる。次に、Moore の方法は有限ステップで停止しないことを述べ、これを解決した方法を述べる。最後に、非存在テストの改良について述べる。

2 基本原理

ある条件を確かめることによって、ある超直方体 $T \in \mathbf{R}^n$ における方程式(1)の唯一解の存在を保証することができるとする。これを存在テストという。また、ある条件を確かめることによって、ある超直方体 $T \in \mathbf{R}^n$ における方程式(1)の解の非存在を保証することもできるとする。これを非存在テストという。全解探索アルゴリズムは、探索領域 T に対して、存在テストと非存在テストを行い、いずれのテストにも成功しない場合は、 T を小領域に分割し、分割された小領域に対して、この操作を再帰的に行うものである(図1)。図6は、ある関数 $f: \mathbf{R}^2 \rightarrow \mathbf{R}^2$ に対して全解探索アルゴリズムを適用した場合の、領域 T の分割の様子を示したものである。

3 Moore の方法

Krawczyk の方法は、非線形方程式の解の精度保証

付き数値計算法の基本であり、存在テストにも非存在テストにも使われる。前の解説にも述べられていると思われるが、ここでも Krawczyk の方法について述べる。ただし、区間や区間演算の基本用語についてはその定義を割愛する。

定理3.1 [2] $f: X \subset \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$ を C^1 級、 F, F' をそれぞれ f, f' の区間包囲とし、 $T \subset X$ を n 次元区間ベクトルとする。また、 $0 < r < 1$ とする。 $c \in \mathbf{R}^n$ を区間 T の中心とし、 C を、中心を T と同じくし、半径が T の r 倍となる微小区間とする。 $n \times n$ 非区間行列 L を $L \in F'(C)$ と選ぶ。また区間行列 M を

$$M = E - L^{-1}F'(T),$$

区間 T に対する区間写像 $K(T)$ を

$$K(T) = c - L^{-1}F(C) + M(T - c)$$

とする。ただし、 E を単位行列とする。このとき、

$$\|M\| < 1, \quad (2)$$

$$K(T) \subset T \quad (3)$$

が成立するならば、方程式(1)の解が T 内に唯一存在する。また、

図1：全解探索アルゴリズムの流れ

† All Solution Algorithm for Nonlinear Equations
Yuchi KANZAWA

* 芝浦工業大学工学部通信工学科
Department of Communication and Electrical Engineering,
Faculty of Engineering, Shibaura Institute of Technology

図2：2次元問題における探索領域の分割の様子

$$K(T) \cap T = \emptyset \quad (4)$$

が成立するならば、方程式(1)の解は T 内に存在しない。

探索領域 T の分割によって得られる小領域すべてに対して、存在テストか非存在テストのいずれかが成功すれば、 T 内の全解を求めたことになる[1]。また、簡単な非存在テストとして次のものがある。

定理3.2 $f: X \subset \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$ に対して、 F を f の区間包囲とし、 $T \subset X$ を n 次元区間ベクトルとする。このとき、

$$F(T) \neq \emptyset$$

ならば、方程式(1)の解は T 内に存在しない。

Krawczyk 法を用いた存在テスト・非存在テストと定理3.2による非存在テストを組み合わせた全解探索アルゴリズムを次に示す。

注意3.1 次章に示すアルゴリズム 4.1 との対比のために、Moore のアルゴリズムを若干改訂している。

アルゴリズム3.1 $f: X \subset \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$ を C^1 級、 F, F' をそれぞれ f, f' の連続な区間包囲とし、超直方体領域 $T \subset X$ を解の探索領域とする。また、

- (1) 探索する区間のリスト $\mathcal{L}$ を、 $\mathcal{L} = \{T\}$ で初期化する。
- (2) $\mathcal{L}$ が空なら終了。そうでないなら、 $\mathcal{L}$ の先頭の要素を取り出して I とし、 $\mathcal{L}$ からその要素を削除する。
- (3) 条件 $F(I) \neq \emptyset$ を調べる。もし真なら I に解はない。(2)へ。
- (4) $c = \text{mid}(I)$ とする。また、 $C = c + r(I - c)$ とする。 $L \in F'(C)$ を適当に選び、 L^{-1} の存在を調べる。全く存在しなければ(7)へ。
- (5) E を単位行列とし、区間行列

$$M = E - L^{-1}F'(I')$$

を計算する。 $\|M\| \geq 1$ なら(7)へ。そうでなければ、

$$K = c - L^{-1}F(C) + M(I - c)$$

を計算する。 $K \in I$ ならば、方程式(1)の解が I 内に唯一存在する。(2)へ。

- (6) I を I_1, I_2 の2つの区間に分割し、それを $\mathcal{L}$ の末尾に付け加え、(2)へ。

4 有限ステップで停止する方法

4.1 アルゴリズム

Moore の方法によって有限ステップで全ての解を求めることは必ずしも保証されることが知られている。解が区間 T の境界に存在する場合、Krawczyk の方法は解の存在を保証することができない。探索領域 T の境界に解が存在する場合には、分割によって得られる小区間の境界に存在し続けることになり、分割が無限に繰り返されることになる。

著者らは、存在テストの対象となる区間を膨らませることによってこの問題を解決した。具体的には、文献[2]の方法を採用し、区間 $I \in I(X)$ について、中

心のニュートン写像による修正量の ρ 倍 ($\rho > 1$) と, 元の区間の半径とを比べ, 大きい方を区間の半径とする. すなわち, 新しい区間を I' として, $C = B(\text{mid}(I), r)$ $\varepsilon = \rho \|L^{-1}\{F(C)\}\|$, $I' = B(c_x, \varepsilon) \cup I$ と定める. 但し, $B(x, p)$ は中心 $x \in \mathbf{R}^n$, 半径 p の球とする.

また, 定義にしたがって構成される区間包囲の精度が悪い場合にはやはり, 分割を続けても解の存在, 非存在両方の判定に失敗してしまい, アルゴリズムが有限ステップで終了しない場合がある. そこで次を仮定する.

仮義4.1 f, f' の区間包囲 F, F' は, 次の定義の意味で, $X \subset \mathbf{R}^n$ で連続であるとする.

定義4.1(区間包囲の連続性) [2]

c を $I \in \mathcal{I}(U)$ の中心とする. $f: U \rightarrow \mathbf{R}^n$ を連続写像, $F: \mathcal{I}(U) \rightarrow \mathcal{I}(\mathbf{R}^n)$ を f の区間包囲とする. このとき, 点 $c \in U$ において, 全ての $\varepsilon > 0$ に対してある $\delta > 0$ が存在して $\text{rad}(I) \neq 0$ かつ

$$\|I - c\| < \delta \Rightarrow \|F(I) - f(c)\| < \varepsilon \quad (5)$$

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 $c \in U$ で連続であるとき, U で連続であるという.

これは, 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という性質を持ったものである. これらの考察により, 次のアルゴリズムを提案する.

アルゴリズム4.1 $f: X \subset \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$ を C^1 級, F, F' をそれぞれ f, f' の連続な区間包囲とし, 超直方体領域 $T \subset X$ を解の探索領域とする. また, $\rho > 1$, $0 < r < 1$ を定数とする.

- (1) 探索する区間のリスト $\mathcal{L}$ を, $\mathcal{L} = \{T\}$ で初期化する.
- (2) $\mathcal{L}$ が空なら終了. そうでないなら, $\mathcal{L}$ の先頭の要素を取り出して I とし, $\mathcal{L}$ からその要素を削除する.
- (3) 条件 $F(I) \ni 0$ を調べる. もし真なら I に解はない. (2)へ.
- (4) $c = \text{mid}(I)$ とする. また, $C = c + r(I - c)$ とする. $L \in F'(C)$ を適当に選び, L^{-1} の存在を調べ

る. 全く存在しなければ(7)へ.

- (5) $I' = I \cup B(c, \rho \|L^{-1}F(C)\|)$ を計算する. 但し, $B(c, r)$ は区間 I における中心 c , 半径 r の球とする.

- (6) E を単位行列とし, 区間行列

$$M = E - L^{-1}F'(I')$$

を計算する. $\|M\| \geq 1$ なら(7)へ. そうでなければ,

$$K = c - L^{-1}F(C) + M(I' - c)$$

を計算する. $K \in I'$ ならば, 方程式(1)の解が I 内に唯一存在する. (2)へ.

- (7) I を I_1, I_2 の2つの区間に分割し, それを $\mathcal{L}$ の末尾に付け加え, (2)へ.

Krawczyk の方法は特異解の存在を保証することができない. そこで, 以下の仮定をする.

仮定4.2 0 は f の正則値とする.

ただし, 正則性に関して, 次の定義にしたがう.

D を $\mathbf{R}^1$ の有界開集合とする.

定義4.2 $f: U \rightarrow \mathbf{R}^n$ を C^1 級とする. このとき,

1. f が $x \in U$ で正則であるとは, $f'(x)$ が連続な全射であることをいう. そうでないとき, 特異であるという. このような x を f の特異点という.
2. $y \in \mathbf{R}^n$ が f の特異値であるとは, $f^{-1}(y)$ が f の特異点を含むことをいう. そうでないとき, f の正則値であるという.

解が特異となる確率は0であるため, この仮定は実用上問題ないと考えられる.

また, 次を仮定する.

仮定4.3 初期区間を n 回分割したときにできるすべての区間 I に対して, $\|\text{rad}(I)\| \rightarrow 0$, ($n \rightarrow \infty$) が成立する.

この仮定は, 分割された全ての区間の半径は, 分割が

進むにしたがって 0 に収束することの仮定である。これらの仮定の下で、アルゴリズム 4.1 は有限ステップで終了することを以下に保証する。

定理 4.1 [3] 仮定 4.1, 4.2, 4.3 の下で、アルゴリズム 4.1 は有限ステップで終了する。

4.2 数値例

上に示したアルゴリズム 4.1 を計算機上で実現したシステムを用いて、簡単な数値例を以下に示す。ただし、アルゴリズム 4.1 における定数 ρ と r はそれぞれ $2, 10^{-6}$ とした。

プログラム言語は、David I. Bell 氏による

CALC-C-style arbitrary precision calculator
: version 1.26.4

を改良したものを用いた。

得られた値は有理数であるが、本論文の表には小数点以下 6 桁目を外側に丸めた値が示されている。また、実行時間は小数点以下を切り上げた値が示されている。

例 4.1 また文献 [4] で紹介されている、エサキダイオードからなる非線形抵抗回路においても同様に全解探索を試みる。この文献では 50 次元の回路方程式としているが、次元 3, 4, 5, 6 として全解探索を試みる。この回路方程式 $f(x)$ は

$$\begin{cases} g(x_1) + x_1 + x_2 + \cdots + x_n = 1, \\ g(x_2) + x_1 + x_2 + \cdots + x_n = 2, \\ \vdots \\ g(x_n) + x_1 + x_2 + \cdots + x_n = n \end{cases} \quad (6)$$

で示され、エサキダイオードの $V-I$ 特性を

$$g(x) = 2.5x^3 - 10.5x^2 + 11.8x \quad (7)$$

とする。

$x_k \in [-2, 2] (k=1, \dots, n)$ の範囲で全解を探索する。本アルゴリズムでの出力結果を表 1 に示す。

5 非存在テストの改良

理論的には [3] の方法を用いて非線形方程式の全解探索が可能であるが、その実行時間は膨大であり、実用的でない。

探索領域内のほとんどは解の存在しない領域であり、非存在テストの性能向上は、全解探索の実行時間を飛躍的に短くすることになる。特に Yamamura は、線形計画法を用いた非存在テストを提案し、精度保証付きではないが、全解探索の実行時間を著しく縮めた。以

表 1 : 方程式 (6) の各次元に対する全ての解

n			解を唯一含む区間
3	#1	x_1	$[0.04556, 0.04737]$
		x_2	$[0.14702, 0.14930]$
		x_3	$[0.27698, 0.28006]$
4	#1	x_1	$[-0.05391, 0.05388]$
		x_2	$[0.02896, 0.02900]$
		x_3	$[0.12685, 0.12690]$
		x_4	$[1.56471, 1.56493]$
	#2	x_1	$[0.01938, 0.01941]$
		x_2	$[0.11530, 0.115323]$
		x_3	$[0.23489, 0.23493]$
		x_4	$[0.40543, 0.40549]$
5	#1	x_1	$[0.08442, -0.08442]$
		x_2	$[-0.00612, -0.00611]$
		x_3	$[0.08487, 0.08488]$
		x_4	$[1.73261, 1.73262]$
		x_5	$[0.34564, 0.34565]$
	#2	x_1	$[-0.01414, -0.01413]$
		x_2	$[0.07539, 0.07540]$
		x_3	$[0.18397, 0.18398]$
		x_4	$[0.32836, 0.32837]$
		x_5	$[0.59535, 0.59536]$
	#3	x_1	$[-0.04601, -0.04602]$
		x_2	$[0.03809, 0.03810]$
		x_3	$[0.13793, 0.13794]$
		x_4	$[0.26473, 0.26474]$
		x_5	$[1.17087, 1.17088]$
6	#1	x_1	$[-0.09139, -0.08878]$
		x_2	$[-0.014005, -0.01113]$
		x_3	$[0.07555, 0.07896]$
		x_4	$[0.18415, 0.18848]$
		x_5	$[1.37318, 1.39160]$
		x_6	$[0.59847, .61277]$
	#2	x_1	$[-0.13630, -0.13624]$
		x_2	$[-0.06482, -0.06476]$
		x_3	$[0.01637, 0.01643]$
		x_4	$[0.11168, 0.11176]$
		x_5	$[1.61899, 1.61936]$
		x_6	$[1.26290, 1.26322]$

下、その基本的な考えを述べる。簡単な非存在テストとして、対象区間 T に対して、区間演算を用いて $\{f(x) | x \in T\}$ を求め、零を含まないことを確かめるものがある。また、単純な区間演算の代わりに、変数の 1 次相関性を考慮した平均値形式を用いる方法もある。これらは、 $f_1, \dots, f_n$ の T に対する値域が零を含む場合には当然、非存在テストに失敗する。より高次の相関性を考慮する方法を用いれば、 $f_1, \dots, f_n$ の値域をより精度良く得ることができるが、仮に、あらゆる相関性を考慮して $f_1, \dots, f_n$ の値域を正確に得ることができたとしても、非存在テストに失敗する非存在領域がある。

$$f_k(x) = 0 \quad (k \in \{1, \dots, n\}) \quad (8)$$

となる x は一般に $n-1$ 次元多様体となる。これら非存在テストは、多様体(8)が一つでも T 内に存在しないことを確認するものである。よって、これら n 個の多様体が T 内に存在すれば、これら非存在テストは失敗するが、その交点が T 内に存在しなければ当然、解は T 内に存在しない。 n 個の多様体(8)の交点が探索領域内に存在しないことを確かめられれば、従来法よりも効率良く、解の非存在領域を特定できることになる。そのような方法の一つに Yamamura の方法がある [5]。以下、Yamamura の方法の基本的な考えを述べる。

領域 T 内で非線形方程式(1)が解を持たないことは、数理計画法の観点から考えれば、 T を $\underline{x} \leq x \leq \bar{x}$ とするとき、制約条件

$$\begin{aligned} \underline{x} &\leq x \leq \bar{x}, \\ f(x) &= 0 \end{aligned}$$

を満たす実行可能解が存在しないことと同値である。これを直接解くことは非常に難しいので、これを緩和した制約条件を考える。緩和することによって得られた制約条件が線形ならば、線形計画法の初等的な方法—例えば、二段階単体法のフェーズ1—を用いて確かめられる。

緩和は例えば次のように行われる。非線形方程式(1)を構成する非線形関数 $f_k(x)$ ($k \in \{1, \dots, n\}$) に含まれる基本非線形演算 $\phi_{k,l}(x)$ ($l \in \{1, \dots, m_k\}$) を用いて $f_k(x)$ が

$$f_k(x) = \sum_{i=1}^n a_{k,i} x_i + b_k + \sum_{l=1}^{m_k} \phi_{k,l}(x)$$

と表されたとする。ここで、 $\underline{x} \leq x \leq \bar{x}$ において、ある定数 $\underline{p}_{k,l,i}, \underline{q}_{k,l}, \bar{p}_{k,l,i}, \bar{q}_{k,l}$, $i \in \{1, \dots, n\}$ を用いて

$$\sum_{i=1}^n \underline{p}_{k,l,i} x_i + \underline{q}_{k,l} \leq \phi_{k,l}(x) \leq \sum_{i=1}^n \bar{p}_{k,l,i} x_i + \bar{q}_{k,l}$$

が成立するとする。これは、非線形関数の上下限を二つのアフィン関数で表したことになる。形式的に、

$$x_{n+\sum_{k=1}^n m_k + l} = \phi_{k,l}$$

とすると、 $f_k(x)$ は

$$\begin{aligned} f_k(x) &= \sum_{i=1}^n a_{k,i} x_i + b_k + \sum_{l=1}^{m_k} \phi_{k,l}(x) \\ &= \sum_{i=1}^{n+\sum_{k=1}^n m_k} a_{k,i} x_i + b_k \end{aligned}$$

$$a_{k,i} = \begin{cases} 1 & \text{for } \left(n + \sum_{j=1}^{k-1} m_j + 1 \leq i \leq n + \sum_{j=1}^k m_j \right) \\ 0 & \text{for } \left(n+1 \leq i \leq n + \sum_{j=1}^{k-1} m_j \right) \text{ or } \left(n + \sum_{j=1}^k m_j + 1 \leq i \leq n + \sum_{j=1}^n m_j \right) \end{cases}$$

と表される。これにより、元の制約条件を含む線形制約条件

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n+\sum_{j=1}^n m_j} a_{k,i} x_i + b_k &= 0 \\ \underline{x} &\leq x \leq \bar{x} \\ \sum_{i=1}^n \underline{p}_{k,l,i} x_i + \underline{q}_{k,l} &\leq x_{k+1} \leq \sum_{i=1}^n \bar{p}_{k,l,i} x_i + \bar{q}_{k,l} \end{aligned}$$

が得られる。

緩和の度合いが緩すぎると、元の制約条件が実行可能解を持っていないでも緩和された制約条件が実行可能解を持ってしまい、解の非存在を保証できない。しかし、緩和の度合いをきつくすることは、新しい制約条件を大規模複雑にしてしまい、実行可能判定に掛ける計算量を増やしてしまう。その点、Yamamura は絶妙なバランスから、全解探索の実行時間を著しく縮めた。Yamamura はさらに双対単体法を用いてこの方法を精錬し、実行時間のさらなる短縮に成功している[6]。

Yamamura はこの方法を精度保証付きで行う手法を提案していない。この方法を精度保証付きで行うためには、丸めモードの制御や区間演算を用いて制約条件の緩和を数値的に正しく行い、線形計画法を精度保証付きで行えば良い。精度保証付き線形計画法には[7], [8], [9] などがある。Nakaya らは有理数演算と区間演算を用いて Yamamura の方法を実装し、実用的な問題を解いた [10]。

「 n 個の多様体(8)の交点が探索領域内に存在しないことを確かめる」ための他の方法として [11] がある。

6 おわりに

本解説では、非線形方程式(1)の全ての解を精度保証付きで求めるアルゴリズムについて述べた。

非線形方程式の全解探索は、多くの分野で需要がある一方で、精度保証付き数値計算技術の総力が結集されているため、それら需要に答えるべく、精度保証付き数値計算技術向上の牽引役として、今後、ますます発展していくと思われる。

参 考 文 献

- [1] Moore, R., E. and Jones, S., T.: "Safe Starting Regions for Iterative Methods," SIAM J. Numer. Anal., Vol14, pp.1051-1065 (1977).
- [2] 柏木雅英, 大石進一: "区間解析と有理数演算による非線形方程式の近似解の精度保証", 電子情報通信学会論文誌, A Vol. J77-A NO.10 pp.1372-1382 (1994).
- [3] 神沢雄智, 柏木雅英, 大石進一, 中村晴幸: "有限ステップで停止する非線形方程式の全ての解を精度保証付きで求めるアルゴリズム", 電子情報通信学会論文誌, Vol.J80-A, No.6, pp.920-925 (1997-6).
- [4] Yamamura, K. and Horiuchi, K.: "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.
- [5] Yamamura, K. and Hata, Y.: "Finding All Solution of Weakly Nonlinear Equations Using Linear Programming", IEICE Trans. Fundamentals, Vol. E83-A, No.12, pp.2758-2761 (2002).
- [6] Yamamura, K. and Fjioka, T.: "Finding All Solution of Nonlinear Equations Using the Dual Linear Programming", Proc. 2001 International Symposium of Nonlinear Theory and Its Applications, pp.- (2001).
- [7] Kashiwagi, M.: "Simplex Method for Calculating Optimal Value with Guaranteed Accuracy", Proc. 1997 International Symp. Nonlinear Theory and its Application (1997).
- [8] Jansson, C.: "Zur Linearen Optimierung mit unscharfen daten", Dissertation, Universität Kaiserslautern (1985).
- [9] Hocks, M.: "Innere - Punkt - Methoden und automatische Ergebnisverifikation in der Linearen Optimierung", Dissertation, Universität Karlsruhe (1995).
- [10] Nakaya, Y. and Oishi, S.: "Finding All Solutions of Nonlinear Systems of Equations Using Linear Programming with Guaranteed Accuracy", J. Universal Computer Science, Vol. 4, Issue 2 (1998).
- [11] Kashiwagi, M.: "Interval arithmetic with linear programming—Extension of Yamamura's idea—", Proc. 1996 International Symp. Nonlinear Theory and its Application, pp.61-64, (1996).

(2003年2月6日 受付)

[問い合わせ先]

〒108-8568 東京都港区芝浦3-9-14

芝浦工業大学工学部通信工学科

神澤 雄智

Tel fax : 03-5476-2474

E-mail : kanz@kanz.ce.shibaura-it.ac.jp

著 者 略 歴

かんざわ ゆう ち
神澤 雄智

1998年 早稲田大学大学院理工学研究科博士後期課程修了(博士(工学))。1997年 早稲田大学理工学部情報学科助手。2000年 芝浦工業大学工学部通信工学科講師。現在に至る。精度保証付き数値計算に関する研究に従事。