

Krawczyk 法における候補者集合の作り方について

柏木 雅英

kashi@waseda.jp

<http://verifiedby.me/>

早稲田大学 基幹理工学部 応用数理学科

2021 年 11 月 28 日

Krawczyk 法 (Krawczyk(1969), Kahan(1968))

区間演算を用いて、非線形方程式 $f(x) = 0$, $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ の解の存在を保証する。

Krawczyk 法

$I \subset \mathbb{R}^n$ は区間ベクトル (候補者集合), $c = \text{mid}(I)$, $R \simeq f'(c)^{-1}$, E は単位行列とし、

$$K(I) = c - Rf(c) + (E - Rf'(I))(I - c)$$

としたとき、 $K(I) \subset \text{int}(I)$ ならば I に $f(x) = 0$ の解が唯一存在する。
($\text{int}(I)$: I の内部)

証明

$g(x) = x - Rf(x)$ に対して平均値形式と縮小写像原理を適用する。

Krawczyk 法は $f'(I)$ (区間 I における f の全てのヤコビ行列を包含する区間行列) を持つ \implies **自動微分が必要**

Krawczyk 法を導く (1)

縮小写像の原理

X を $d(x, y)$ を距離とする完備距離空間とし、 $g : X \rightarrow X$ を全ての $x, y \in X$ に対して

$$d(g(x), g(y)) \leq \alpha d(x, y)$$

を満たすような写像とする。但し、 $\alpha < 1$ とする。(このような g を縮小写像と言い、実数 α を縮小定数と言う。) このとき、以下が成立する:

- ① $g(x) = x$ を満たす点 x^* (不動点と言う) が X に唯一存在する。
- ② x_0 を X 内の任意の点とし、点列 $\{x_k\}$ を $x_{k+1} = g(x_k)$ で定めると、 x_k は x^* に収束し、その収束速度は $d(x_k, x^*) \leq \frac{\alpha^k}{1 - \alpha} d(x_1, x_0)$ で表される。
- ③ X 内の任意の点 x_0 に対して、 $d(x_0, x^*) \leq \frac{d(g(x_0), x_0)}{1 - \alpha}$ が成立。

Krawczyk 法を導くため、縮小写像原理を以下のように読み替える。

X : \mathbb{R}^n に含まれる区間ベクトル (閉集合)
 $d(x, y)$: $\|x - y\|$ 。但しノルムは $\|x\| = \max |x_i|$ (最大値ノルム)

Krawczyk 法を導く (2)

非線形方程式

$$f(x) = 0, \quad f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$$

の解が区間ベクトル $I \subset \mathbb{R}^n$ に存在することを保証する。そのため、 $c = \text{mid}(I)$ として、行列 $R \simeq f'(c)^{-1}$ を用いて、写像

$$g(x) = x - Rf(x)$$

を考える。 R が逆行列を持つならば

$$f(x) = 0 \iff g(x) = x$$

である。 g が I において縮小写像原理の仮定を満たすことを示すには、

- ① $\{g(x) \mid x \in I\} \subset I$ (g が I から I への写像であること)
- ② g が I 上で縮小写像であること。

の2つを示せばよい。

Krawczyk 法を導く (3)

条件 ①

$g(x) = x - Rf(x)$ に対して平均値形式を適用して、(E は単位行列)

$$\begin{aligned}K(I) &= g(c) + g'(I)(I - c) \\ &= c - Rf(c) + (E - Rf'(I))(I - c)\end{aligned}$$

のような写像 K (Krawczyk 写像という) について、 $K(I) \subset I$ を確認する。

(単に $g(I) = I - Rf(I)$ を計算して $g(I) \subset I$ を確認しようしてもうまくいかないことに注意)

条件 ②

平均値形式により $\forall x, y \in I$ について $g(x) \in g(y) + g'(I)(x - y)$ なので、区間行列のノルムを $\|g'(I)\| = \max_{X \in g'(I)} \|X\|$ と定義すると

$$\|g(x) - g(y)\| \leq \|g'(I)\| \|x - y\|$$

が成立するので、 $\|g'(I)\| = \|E - Rf'(I)\| < 1$ を確認する。

Krawczyk 法を導く (4)

注意 1

「 R が逆行列を持つならば $f(x) = 0 \iff g(x) = x$ 」と書いたが、
 $\|E - Rf'(I)\| < 1$ ならば自動的に R は逆行列を持つので改めて確認する必要はない。

証明: R が非正則とすると、ある行列 $A \in f'(I)$ に対して RA も非正則となり、よって $RAx = 0$ となるベクトル $x \neq 0$ が存在する。すると、 $(E - RA)x = x$ となるので $\|E - RA\| \geq 1$ となり、これは矛盾。

注意 2

$c - Rf(c) + (E - Rf'(I))(I - c) \subset \text{int}(I)$ ならば、自動的に $\|E - Rf'(I)\| < 1$ が言えるので、改めて確認する必要はない。

略証: ベクトル $x \in \mathbb{R}^n$ に対する scaled maximum norm を、 $\|x\|_u = \max\{|x_i|/u_i | 1 \leq i \leq n\}$ で定める。但し scaling vector u は全成分が非負。これで誘導される行列ノルムは

$\|A\|_u = \sup_{\|x\|_u=1} \|Ax\|_u = \|\text{mag}(A)u\|_u$ 。このとき、

$c - Rf(c) + (E - Rf'(I))(I - c) \subset \text{int}(I) \Rightarrow \text{mag}(E - Rf'(I))\text{rad}(I) < \text{rad}(I)$ なので、

$u = \text{rad}(I)$ と定めると、 $\text{mag}(E - Rf'(I))u < u$ より $\|\text{mag}(E - Rf'(I))u\|_u < 1$ 。これは、

$\|E - Rf'(I)\|_u < 1$ を示している。

例題

方程式 $\begin{cases} x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0 \\ x_1 - x_2 = 0 \end{cases}$ の解が区間 $I = \begin{pmatrix} [0.6, 0.8] \\ [0.6, 0.8] \end{pmatrix}$ にあることを示す。

計算例

ヤコビ行列 $f'(x) = \begin{pmatrix} 2x_1 & 2x_2 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ はここでは手計算。 $c = \begin{pmatrix} 0.7 \\ 0.7 \end{pmatrix}$ 、 $f'(c) = \begin{pmatrix} 1.4 & 1.4 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ で、 $f'(c)$ の近似 R は、 $R = \begin{pmatrix} 0.4 & 0.5 \\ 0.4 & -0.5 \end{pmatrix}$ とした。このとき、 $f'(I) = \begin{pmatrix} [1.2, 1.6] & [1.2, 1.6] \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ となり、

$$c - Rf(c) + (E - Rf'(I))(I - c) = \begin{pmatrix} [0.68, 0.736] \\ [0.68, 0.736] \end{pmatrix} \subset \text{int} \begin{pmatrix} [0.6, 0.8] \\ [0.6, 0.8] \end{pmatrix}$$

なので、解の一意存在が保証された。

- 計算過程が計算機向きで、ほぼ機械的に行えるのが嬉しい。
- 区間ヤコビ行列 $f'(I)$ の計算を「内部演算を区間演算に置き換えた自動微分」で行うことによって、ほぼ完全に機械的に実行可能になる。

近似解を元にした解の存在保証

- 区間ベクトル I が与えられて解の存在を調べるよりも、近似解 c が与えられてその近くに解があるか調べたいケースの方が多そう。
- 近似解 c を中心として、適切な大きさの区間ベクトル I を作って Krawczyk 法を適用する。どうやって作るのが適切か？

問題設定

$R \simeq f'(c)^{-1}$ とし、 $r = |Rf(c)|$ (Newton 法での修正ベクトルの成分毎の絶対値) を判断材料として、ベクトル $u > 0$ として Krawczyk 法のための候補者集合を

$$I = c + [-u, u]$$

のように作る。 u をどうやって決めるのがよいか？

よく使われている方法 (以下、方法 1)

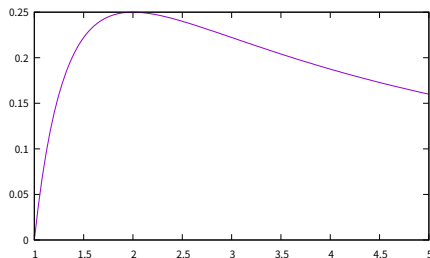
$$u_i = 2 \max_k r_k \quad (1 \leq i \leq n)$$

(Newton 法の修正量のノルムの 2 倍の半径の超立方体)

なぜ Newton 法の修正量の 2 倍か?

$$\begin{aligned}c - Rf(c) + (E - Rf'(I))(I - c) &\subset I \\ \Leftrightarrow -Rf(c) + (E - Rf'(I))(I - c) &\subset I - c \\ \Leftrightarrow r + |E - Rf'(c + [-u, u])|u &\leq u\end{aligned}$$

- 雑に 1 変数化して考える。
- $|E - Rf'(c[-u, u])| \simeq ku$ (u に比例する) と仮定。
- $r + ku^2 \leq u$ を満たすように u を決めたい。 r は既知だが k は未知。
- $k \leq \frac{u-r}{u^2}$ と変形し、右辺を最大化すればよい。
- $u = 2r$ で右辺は最大になる。



超立方体でいいのか?

方法 2

$$u_i = 2r_i \quad (1 \leq i \leq n)$$

- 成分毎に大きさを変え、Newton 法の修正量にそのまま比例させる。
- ある成分の移動量が 0 に近いと区間が潰れてしまうが大丈夫か?

頑張っ成分毎に考えて最適っぽい u を導出 (1)

$$\begin{aligned}c - Rf(c) + (E - Rf'(I))(I - c) &\subset I \\ \Leftrightarrow -Rf(c) + (E - Rf'(I))(I - c) &\subset I - c \\ \Leftrightarrow r + |E - Rf'(c + [-u, u])|u &\leq u\end{aligned}$$

- $|E - Rf'(c + [-u, u])|_{ij} \simeq K\|u\|_1$ と仮定 (u の全成分が均等に寄与し、行列の全成分が同じ比例定数)
- $r + K(\|u\|_1)^2 e \leq u$ ($e = (1, 1, \dots, 1)^t$) が満たすべき式。
- $Ke \leq \frac{u - r}{(\|u\|_1)^2}$ となり、 r は既知、 K は未知なので、

$$\frac{\min(u_1 - r_1, u_2 - r_2, \dots, u_n - r_n)}{(\|u\|_1)^2}$$

を最大化すればよい。

- $\|u\|_1 = u_1 + u_2 + \dots + u_n$ を固定して考えれば、これが最大になるとき

$$u_1 - r_1 = u_2 - r_2 = \dots = u_n - r_n$$

となることは自明。この値を α と置く。

頑張っ成分毎に考えて最適っぽい u を導出 (2)

- $\sum_k u_k = n\alpha + \sum_k r_k$ なので、 $\frac{\alpha}{(n\alpha + \sum_k r_k)^2}$ を最大化する問題に帰着。
- この式は、 $\alpha = \frac{1}{n} \sum_k r_k$ で最大となる。よって、最適な u は、

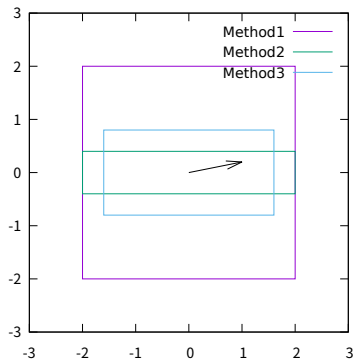
$$u_i = r_i + \frac{1}{n} \sum_k r_k \quad (1 \leq i \leq n)$$

で与えられる (方法 3)。

- Newton 法の修正量の、(成分毎)+(平均) のような形。

3つの方法まとめ

方法 1	$u_i = 2 \max_k r_k$
方法 2	$u_i = 2r_i$
方法 3	$u_i = r_i + \frac{1}{n} \sum_k r_k$



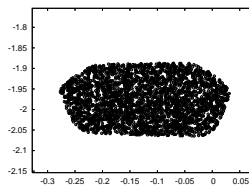
数値実験 1 (1)

方程式

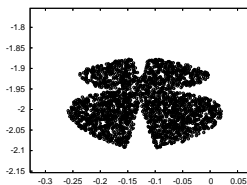
$$-42x_1 + 2x_2^2 + 4x_1x_2 + 4x_1^3 - 14 = 0$$

$$-26x_2 + 2x_1^2 + 4x_1x_2 + 4x_2^3 - 22 = 0$$

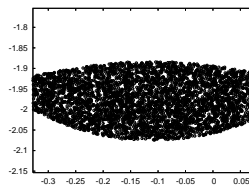
の、解 $(x_1, x_2) = (-0.127961, -1.95371)$ の近傍に近似解を多数設置し、3つの方法それぞれで候補者集合を作り、Krawczyk 法が成功した近似解のみをプロットした。



方法 1



方法 2

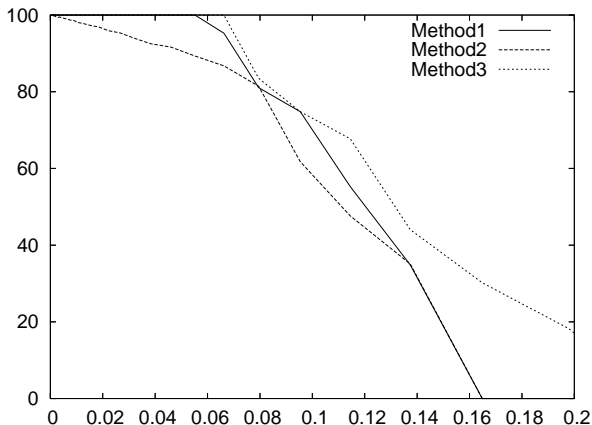


方法 3

方法 2 は軸の方向に弱いこと、方法 3 は広い範囲で成功していることが分かる。

数値実験 1 (2)

真解からの距離と成功率の関係をグラフにしてみた。



方法2では特定の方向に弱いためかなり真解に近い場合でも成功率が100%に達していない、方法3ではかなり遠い距離でも一定の成功率を示している、全ての距離に渡って方法3がもっとも成功率が高い、などのことが分かる。

数値実験 2 (1)

方程式

$$-1 + 6(c_1 c_2 - s_1 s_2) + 10c_1 = 0$$

$$-4 + 6(c_1 s_2 + c_2 s_1) + 10s_1 = 0$$

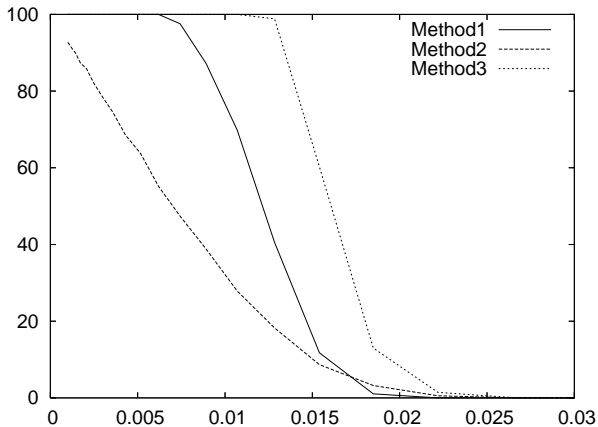
$$c_1^2 + s_1^2 - 1 = 0$$

$$c_2^2 + s_2^2 - 1 = 0$$

の、解 $(c_1, c_2, s_1, s_2) = (0.420113, -0.991667, 0.907472, 0.12883)$ の近傍を同様に調べてみる。

数値実験 2 (2)

真解からの距離と成功率の関係



数値実験 3 (1)

方程式

$$(z_1 - 6)^2 + z_2^2 + z_3^2 - 104 = 0$$

$$z_4^2 + (z_5 - 6)^2 + z_6^2 - 104 = 0$$

$$z_7^2 + (z_8 - 12)^2 + (z_9 - 6)^2 - 80 = 0$$

$$z_1(z_4 - 6) + z_5(z_2 - 6) + z_3z_6 - 52 = 0$$

$$z_1(z_7 - 6) + z_8(z_2 - 12) + z_9(z_3 - 6) + 64 = 0$$

$$z_4z_7 + z_8(z_5 - 12) + z_9(z_6 - 6) - 6z_5 + 32 = 0$$

$$2z_2 + 2z_3 - 2z_6 - z_4 - z_5 - z_7 - z_9 + 18 = 0$$

$$z_1 + z_2 + 2z_3 + 2z_4 + 2z_6 - 2z_7 + z_8 - z_9 - 38 = 0$$

$$z_1 + z_3 + z_5 - z_6 + 2z_7 - 2z_8 - 2z_4 + 8 = 0$$

の、解

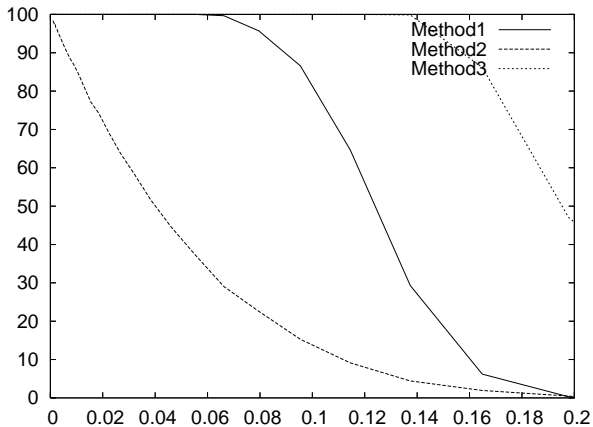
$$(z_1, \dots, z_9)$$

$$= (9.39167, 9.24763, 2.64156, 7.96267, 5.195, 6.32043, 5.01331, 6.50454, 10.9666)$$

の近傍を同様に調べてみる。

数値実験 3 (2)

真解からの距離と成功率の関係



方法 1	$u_i = 2 \max_k r_k$
方法 2	$u_i = 2r_i$
方法 3	$u_i = r_i + \frac{1}{n} \sum_k r_k$

- 超立方体で候補者集合を作るいつもの方法に比べて、完全に成分毎に作ったものは性能が悪く、成分毎 + 平均で作ったものは性能が良さそうなのが数値実験から分かった。
- kv ライブラリの ODE ソルバーでの近似多項式の最終項の係数を膨らませて候補者集合を作るところでもこの方法を使うとよい性能を示す。
- この方法の解釈、更にいい方法など、皆様のご意見を聞きたいです。