(Version: 2014/12/4)

非線形方程式の全解探索について

柏木 雅英

1 はじめに

数値計算において、計算を行うと同時にその結果の誤差評価をも同時に計算するような方法を総称して精度保証付き数値計算と呼び、近年急速な進歩を遂げている。精度保証付き数値計算の実現において最も基本的かつ重要な技法に、区間演算が挙げられる。区間演算とは、実数値を [下限, 上限] という 2 つの浮動小数点数で挟まれた区間で表現し、その区間同士の加減乗除等の演算を「演算結果として有り得る集合を包含するように」定義することにより行われるものである。そのとき、区間の両端を計算する際に丸めの向きを「外向き」にしておくことによって丸め誤差の影響分を区間内に収め、丸め誤差の把握を行うことが出来る。

区間演算を応用して、多変数非線形方程式の与えられた有界領域における全ての解を求めることが出来る。

1. Krawczyk 法などの解の存在定理 (与えられた区間内に解が唯一存在することの十分条件を与える)
2. 解の非存在定理 (与えられた区間内に解が存在しないことの十分条件)

を組み合わせる。与えられた区間に両定理を試し、どちらも成立しないなら区間を二分割して再度試す、という再帰的なアルゴリズムである。

原理は単純だが、このアルゴリズムが安定して動作するように実装するには、様々なノウハウがある。本稿はそのいくつかをまとめたものである。

2 Krawczyk 法

非線形方程式

$$f(x) = 0, \quad \boldsymbol{R}^n \to \boldsymbol{R}^n$$

に対して、区間ベクトル $I \subset \boldsymbol{R}^n$ に解が唯一存在するための十分条件を与える方法である。

$c \in I$ を I の中心またはその近似、$R \simeq f'(c)$ とする。ここで、$g : \boldsymbol{R}^n \to \boldsymbol{R}^n$ を

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

と定義する。R が正則ならば、$f(x) = 0$ と $x = g(x)$ は同値となる。

ここで、

- $\{g(x) \mid x \in I\} \subset I$
- ある定数 $\alpha < 1$ があって、$\forall x, y \in I$ について $\|g(x) - g(y)\| \leq \alpha \|x - y\|$

が成立すれば、縮小写像の原理により g の不動点が I に唯一存在し、それは $f(x) = 0$ の解が I に唯一存在することを意味する。

ここで、後者は、$\max_{x \in I} \|g'(x)\|$ を上から評価すれば良く、$g'(x) = E - Rf'(x)$ なのでそれを区間演算して、

$$\|E - Rf'(I)\| < 1$$

を確認すれば良い。ただし E は単位行列。

前者は、$\{g(x) \mid x \in I\}$ を単に区間演算で評価しようとすると、

$$I - Rf(I) \subset I$$

を確認することになるが、これは区間演算の減算の性質から決して成立しない。そこで、$c = \mathrm{mid}(I)$ として平均値形式を使い、

$$c - Rf(c) + (E - Rf'(I))(I - c) \subset I$$

を確認することにする。これを Krawczyk 法という。以下、

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

を Krawczyk 写像と呼ぶことにする。

R の正則性に関して補足する。$\|E - Rf'(I)\| < 1$ が成立すれば R は正則であることが導かれるので、事前に R が正則であるか確認する必要はない。

また、$I \setminus K(I)$ には解は存在しない、従って $K(I) \cap I = \emptyset$ なら I に解は存在しない、という点も重要。

($K(I)$ が I の「真に内部に」入るならば行列ノルムのチェックは省略出来る。証明は scaled maximum norm を使う。が、まだ書いてない。)

3 解の非存在定理

非存在の確認は簡単である。例えば、単に区間演算を行って

$$f(I) \not\ni 0$$

なら I に $f(x) = 0$ の解は存在しない。あるいは平均値形式を使って、

$$c + f'(I)(I - c) \not\ni 0$$

でも良い。また、前節で述べたように Krawczyk 写像 K を使って

$$K(I) \cap I = \emptyset$$

なら I に解は存在しない。

4　全解探索アルゴリズム

Krawczyk 法による解の存在定理と、解の非存在定理を組み合わせて、どちらかの定理が成立するまで領域を再帰的に分割することによって、与えられた領域内の全ての解を探索することが出来る。擬似コードで書くと、次の通り。

```
function allsol(f, I_0) {
        L = {I_0}    # 調査対象の区間のリスト
        S = {}    # 見つかった解のリスト
        while (L ≠ ∅) {
                I = L.pop()    # L からひとつの要素を取り出す
                if (f(I) ∌ 0) continue    # 解なし
                c = mid(I)
                R ≃ f'(c)^{-1}    # 近似計算で良い
                M = E − Rf'(I)
                K = c − Rf(c) + M(I − c)
                if (K ∩ I = ∅) continue    # 解なし
                if (K ⊂ I and ‖M‖ < 1) {    # 解あり
                        S.append(K)    # 解のリストに追加
                        continue
                }
                I_1, I_2 = divide(K ∩ I)    # K ∩ I を 2 分割
                L.append(I_1)
                L.append(I_2)
        }
        return S
}
```

5　分割の境界問題

区間 I に対する Krawczyk 法は、I の境界 ∂I に解がちょうど乗っている場合、区間演算の過大評価のため $K(I) \subset I$ も $K(I) \cap I = \emptyset$ も成立しない。一度区間の境界に乗ってしまえば、それを分割してもやはり境界上に解があるので、その解の付近で永久に分割を繰り返す無限ループに陥ってしまう。例えば 0 を解に持つ方程式を区間 $[-2, 2]$ で全解探索した場合、最初に $[-2, 0]$ と $[0, 2]$ に分割されてしまうと、この解 0 を発見することはもう出来なくなる。

これを解消するため、我々は次のような方法を用いている。ある定数 $C > 0$ を定めておき、テスト区間 I と Krawczyk 写像の値 $K = K(I)$ について、$K(I) \subset I$

も $K(I) \cap I = \emptyset$ も成立しないとき、

$$\max_i \frac{\mathrm{width}(K_i)}{\mathrm{width}(I_i)} \leq C$$

が成立したならば、I を分割せずに K を I の代わりに次の探索候補としてリストに加える。「$K(I)$ が I 比で十分小さくなっているのにまだ存在も非存在も言えないなら、境界またはその付近である可能性が高い」という考えに基づいている。

C の値は、経験的に 0.9 に定めている (理論的な根拠は無い)。

これを用いると、境界に乗った解、あるいは境界付近の解は、(境界の両側で解の存在が保証されるので) 2 回以上解の存在判定が行われることがある。解の存在が言えたとき、それが過去に見つかっていないか否か判定して見つかっていれば捨てる必要がある。

また、この方法は解が境界付近にあったときに解が中心付近になるように 区間を動かす効果があるため、結果として少ない分割で解の存在保証が行われることになり、全解探索アルゴリズム全体の計算時間の減少に寄与することが多い。

6　平均値形式を用いた区間の削減

方程式 $f(x) = 0$ について、ある区間 I におけるヤコビ行列の包含 $f'(I)$ が得られているとする。ある $1 \leq i \leq n$ を固定し i 本目の式 $f_i(x) = 0$ について考える。f_i に対して平均値形式を考えると、$c = \mathrm{mid}(I)$ として

$$f_i(c) + \sum_{k=1}^{n} f'(I)_{ik}(x_k - c_k)$$

となるが、この x_k をある x_j だけ残し残りを区間 I_k で置き換えると、

$$f_i(c) + \sum_{j=1, j\neq k}^{n} f'(I)_{ik}(I_k - c_k) + f'(I)_{ij}(x_j - c_j)$$

となる。

$$J_{ij} = f_i(c) + \sum_{j=1, j\neq k}^{n} f'(I)_{ik}(I_k - c_k)$$

とおくと、

$$J_{ij} + f'(I)_{ij}(x_j - c_j)$$

と書ける。これを 0 とおいて

$$J_{ij} + f'(I)_{ij}(x_j - c_j) = 0$$

という x_j に関する区間線形方程式を考え、x_j について解くと、

$$x_j = c_j - J_{ij}/f'(I)_{ij}$$

となる。この値は $f'(I)_{ij} \not\ni 0$ なら区間演算で簡単に求まり、またこの区間にしか解は存在し得ないので、調べる領域 I の第 j 成分 I_j を

$$I_j \cap (c_j - J_{ij}/f'(I)_{ij})$$

に削減することが出来る。この手順を全ての i, j について n^2 通り行うことが出来る。

また、この手順によって I が削減されれば、それに伴って J_{ij} も小さくなるので、再帰的に再度実行すると更に削減される可能性がある。$f'(I)$ の再計算も許せば更に再帰的に実行することも出来る。

更に、

$$c_j - J_{ij}/f'(I)_{ij}$$

は、$f'(I)_{ij} \ni 0$ の場合でも 2 つの半無限区間で表現することが出来、それを使うと更に削減できる可能性がある。

7 Krawczyk 法の非成立の高速判定

解の存在を保証する Krawczyk 法は、$R \simeq f'(c)^{-1}$ (逆行列) の計算コストが高い。Krawczyk 法が成功しないことを逆行列を計算する前に知ることが出来れば、Krawczyk 法をスキップすることによって全体の計算時間を削減できる。

Krawczyk 法は、方程式に関する情報としては、$f(c)$ と $f'(I)$ のみを用いるので、Krawczyk 法で解の一意存在が言えるということは、「$\tilde{f}(c) = f(c)$ かつ $\tilde{f}'(x) \in f'(I) \quad (\forall x \in I)$」を満たすような全ての $\tilde{f}(x) = 0$ に対して、解の一意存在を言ったことになる。逆に、そのような条件を満たすある $\tilde{f}(x) = 0$ に対して、解の非存在が言えたならば、Krawczyk 法の成立条件は満たされないはず。

そこで、次のような方法を考える。区間 $I = [\underline{I}, \overline{I}]$ の「小ささ」(mignitude) を、

$$\mathrm{mig}(I) = \begin{cases} 0 & (0 \in I) \\ \underline{I} & (I > 0) \\ \overline{I} & (I < 0) \end{cases}$$

で定義する。行列に対しても、$M = (M_{ij})$ に対して $\mathrm{mig}(M)$ を成分毎に mig を取って並べた行列

$$\mathrm{mig}(M) = (\mathrm{mig(M_{ij})})$$

で定義する。ここで、I 上で定義された関数 $\tilde{f}$ を、

$$\tilde{f}(x) = f(c) + \mathrm{mig}(f'(I))(x - c)$$

とし、この関数に対する解の非存在条件

$$f(c) + \mathrm{mig}(f'(I))(I - c) \not\ni 0$$

を考える。この条件が成立したとき、$f(c)$ と $f'(I)$ を用いた Krawczyk 法は決して成功しないので、逆行列等の計算をスキップできる。
(注意) この方法はある意味では強力すぎて、そのまま使うと

- I から $K(I) \cap I$ への探索領域の縮小
- 5 節で述べた境界に乗った解への対処

が発動しなくなってしまう副作用がある。そこで、現在次のように少し「弱めて」使っている。続きはまだ書いてない。

8　全解探索アルゴリズム 2

以上のテクニックを総合すると、全解探索アルゴリズムは次のようになる。
続きはまだ書いてない。

9　関数間の相関を利用する方法

まだ書いてない。

10　おわりに

このドキュメントはまだまだメモ程度なので、あまり信用せずに読んで欲しい。