

交差数の数値計算と応用

東京大学・新領域創成科学研究科 村重 淳 (Sunao Murashige)
Graduate School of Frontier Sciences,
The University of Tokyo

1 はじめに

写像度のようなトポロジ的指標が、複雑な問題を体系的にとらえるときに役に立つことはよく知られている。特に、写像度は平衡点の存在や数、分岐、系の複雑さと関係する重要な指標である [1, 2, 3, 4]。一般に写像度を解析的に求めることは難しいので、その数値計算法に関する研究がこれまでにいくつか行われてきた [5, 6, 7, 8, 9]。しかし、他のトポロジ的指標と同様に、実用的な応用を考えると計算時間がつねに問題となる。本研究では、写像度は交差数の特別な場合として定義できることに注目し、有限次元の問題 $f(x) = 0$ に対する写像度の効率の良い計算方法を考える。

有限次元系に対する写像度は次のように定義できる。

定義 1. $f: \bar{B} \rightarrow \mathbb{R}^n$ は C^1 級写像, $B \subset \mathbb{R}^n$ は有界な開集合, $\bar{B}$ は B の閉包, $0 \in \mathbb{R}^n$ は f の正則値, すなわち Jacobi 行列 $\partial f / \partial x$ at $x = f^{-1}(0) \in B$ は正則, $0 \notin f(\partial B)$, ∂B は B の境界, とする。このとき, 写像度 $\deg(f, 0, B)$ は次式で定義される。

$$\deg(f, 0, B) = \sum_{x^* \in f^{-1}(0)} \operatorname{sgn} \left(\det \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) \Big|_{x=x^*} \right), \quad (1)$$

ここで, $f^{-1}(0) = \{x \in B : f(x) = 0\}$ 。また, $0 \in \mathbb{R}^n$ が f の臨界値の場合は, f をわずかに変化させることにより, 対応する写像度を定義できる ([3], p.523)。□

この定義より, 次のような Kronecker の存在原理が得られる。

$$\deg(f, 0, B) \neq 0 \Rightarrow \exists x^* \in B : f(x^*) = 0. \quad (2)$$

また, 写像度の重要な性質としてはホモトピー不変性, すなわち「 f が $f(\partial B) \neq 0$ をみたしながら連続的に変化するとき, 写像度 $\deg(f, 0, B)$ は不変」があげられる。

これまでの写像度の数値計算に関する研究 [6, 7, 8] のほとんどは Stenger [5] が導いた関係式

$$\deg(f, 0, B) = \sum_{j \in \Lambda} \deg(\hat{f}^1, 0, \partial B_j), \quad (3)$$

を用いている。ここで、 $f = (f_1, f_2, \dots, f_n)$, $\hat{f}^1 = (f_2, f_3, \dots, f_n)$, $\partial B = \sum_{j=1}^N \partial B_j$ with $\partial B_i \cap \partial B_j = \emptyset$ ($i \neq j$), Λ は ∂B_j 上で $f_1 > 0$ となる添字 j の集合, をそれぞれ表す。(3) は写像度が境界上の値 $f(\partial B)$ のみで決まることを表している。さらに, Kearfott ら [8] はこの数値計算法と (2) を用いて, 特異性を含む有限次元問題の解の数値的検証 (精度保証付き数値計算) を行った。

一方, 写像度は次のように交差数の特別な場合として定義することができる。

$$\deg(f, 0, B) = I(f(B), \{0\}), \quad (4)$$

ここで, $I(f(B), \{0\})$ は有向交差数を表し, 二つの集合 $f(B)$ と $\{0\}$ の交点における orientation number $+1$ or -1 の和として定義される [1, 2, 4]. Aberth [9] は (4) に基づき, (3) と等価な関係式と区間演算を用いて写像度を求める数値計算法を提案した。

本研究の目的は, 次元の大きい一般の問題に対しても効率良く写像度を求めることができる数値計算法を開発することである。Kearfott ら [8] は彼らのアルゴリズムに前処理を施すことにより次元の大きな問題でも写像度を求めることができることを示しているが, 本研究では Aberth の方法を改良することを試みる。Aberth の方法を採用する理由は, アルゴリズムが比較的シンプルであるから, 特に導関数や行列式を求める必要がなく, B の境界 ∂B 上の f の符号だけを求めればよいからである。本研究ではさらにいくつかの工夫を加えることにより, 次元の大きい問題に対しても実用的な計算時間で写像度を求めることができることを示す。

2 Aberth の方法 [9]

2 節では, C^1 級写像 $f: \bar{B}(\subset \mathbb{R}^n) \rightarrow \mathbb{R}^n$ の写像度 $\deg(f, 0, B)$ を求める Aberth の方法 [9] について簡単にまとめる。

まず, $\bar{B}$ は次のように区間の積として与えられているとする。

$$\bar{B} = [\underline{x}_1, \bar{x}_1] \times [\underline{x}_2, \bar{x}_2] \times \cdots \times [\underline{x}_n, \bar{x}_n]. \quad (5)$$

Aberth の方法のポイントは次の関係を B の各境界に逐次適用することである。

補題 1. ([4] p.84) 有向交差数 $I(f(B), \{0\})$ は次のように表すことができる。

$$I(f(B), \{0\}) = I(f(\partial B), H_1), \quad (6)$$

ここで, $H_1 = \{(h_1, 0, \dots, 0) \in \mathbb{R}^n : h_1 > 0\}$. □

B の境界 ∂B はいくつかの要素 $\{\partial B_j^{n-1}\}$ に分割することができる。このとき, $\partial B = \sum_{j=1}^{N_1} \partial B_j^{n-1}$ で $\partial B_k^{n-1} \cap \partial B_\ell^{n-1} = \emptyset$ ($k \neq \ell$), ∂B_j^{n-1} の次元は $n-1$, f の第 1 成分 f_1

の符号は ∂B_j^{n-1} の内部で一定, とする. 写像度の加法性より, (6) の $I(f(\partial B), H_1)$ は次のように表すことができる.

$$I(f(\partial B), H_1) = \sum_{j=1}^{N_1} I(f(\partial B_j^{n-1}), H_1) . \quad (7)$$

(4) より交差数 $I(f(\partial B_j^{n-1}), H_1)$ は次のように解釈することができる.

$$I(f(\partial B_j^{n-1}), H_1) = \begin{cases} \deg(\hat{f}^1, 0, \partial B_j^{n-1}) & \text{for } f_1 > 0 \text{ on } \partial B_j^{n-1} \\ 0 & \text{for } f_1 \leq 0 \text{ on } \partial B_j^{n-1} , \end{cases} \quad (8)$$

ここで, $\hat{f}^1 = (f_2, f_3, \dots, f_n)$. したがって, (6) は (3) と等価である. さらに, ∂B_j^{n-1} の境界を考え, (6) を用いると, 次の関係式を得る.

$$I(f(\partial B_j^{n-1}), H_1) = \sum_{j_2=1}^{N_j} I(f(\partial B_{j_2}^{n-2}), H_2) , \quad (9)$$

ここで, $\sum_{j_2=1}^{N_j} \partial B_{j_2}^{n-2}$ は ∂B_j^{n-1} の境界で, $H_2 = \{(h_1, h_2, 0, \dots, 0) \in \mathbb{R}^n : h_1, h_2 > 0\}$ である.

これらより, 次のような関係が得られる.

$$\begin{aligned} \deg(f, 0, B) &= I(f(B), \{0\}) \\ &= \sum_{j_1=1}^{N_1} I(f(\partial B_{j_1}^{n-1}), H_1) \\ &= \sum_{j_1=1}^{N_1} \sum_{j_2=1}^{N_{j_1}} I(f(\partial B_{j_2}^{n-2}), H_2) \\ &\quad \vdots \\ &= \sum_{j_1=1}^{N_1} \cdots \sum_{j_n=1}^{N_{j_{n-1}}} I(f(\partial B_{j_n}^0), H_n) , \end{aligned} \quad (10)$$

ここで, $\sum_{j_k=1}^{N_{j_{k-1}}} \partial B_{j_k}^{n-k}$ は $\partial B_{j_{k-1}}^{n-k+1}$ の境界で, $H_k = \{(h_1, \dots, h_k, 0, \dots, 0) \in \mathbb{R}^n : h_1, \dots, h_k > 0\}$ である. $\partial B_{j_k}^{n-k}$ の次元は $n-k$ であるので, (10) は「写像度が十分に細かく分割した境界 ∂B_j^{n-1} の頂点 (有限個) における f の符号の和として求めることができる」ことを示している.

Aberth の方法は (10) に基づき, 有向交差数 $I(f(\partial B_j^{n-k}), H_k)$ の計算に寄与する境界 ∂B_j^{n-k} , すなわち次のような条件をみたす点 $x \in \partial B_j^{n-k}$ を含む境界を探索する.

$$f_\ell(x) \begin{cases} > 0 & (\ell = 1, 2, \dots, k) , \\ = 0 & (\ell = k+1, k+2, \dots, n) . \end{cases} \quad (11)$$

各境界は区間の積で与えられているので、この条件 (11) は区間演算を用いて調べることができる。また、各境界 ∂B_j^{n-k} の向き $\sigma(\partial B_j^{n-k})$ は凸胞体 [2] の向きの与え方と同じようにして決めることができる。 $\sigma(B)$ は +1 とする。

Aberth の方法のアルゴリズムは次のようにまとめることができる。

Step 1. : $k := 1$ とする。 B とその境界 ∂B_j^{n-k} の向きを決める。

Step 2. : 各境界 ∂B_j^{n-k} を区間の積として表す。 $\ell = k, k+1, \dots, n$ に対する $f_\ell(\partial B_j^{n-k})$ を区間演算を用いて計算する。

Step 3. : 次のようにして、条件 (11) を調べる。

- $f_k > 0$ かつ $f_\ell \ni 0$ for $\forall \ell = k+1, \dots, n$ の場合、対応する境界とその向きをリストに残す。
- $f_k < 0$ あるいは $f_\ell \not\ni 0$ for $\exists \ell = k+1, \dots, n$ の場合、対応する境界をリストから削除する。
- $f_k \ni 0$ かつ $f_\ell \ni 0$ for $\forall \ell = k+1, \dots, n$ の場合、対応する境界をさらに分割し、Step 2 に戻る。

Step 4. : Step 2 と Step 3 をすべての j に対して実行した後、 $k := k+1$ として Step 2 に戻り $I(f(\partial B_j^{n-k}), H_k)$ の評価を行う。

$k = n$ で終了する。そのとき、リストに残った向き orientation number の和が $I(f(B), \{0\})$, すなわち $\deg(f, 0, B)$ を与える。

境界の集合 $\{\partial B_j^{n-k}\}$ は図 1 のように木構造をしている。上記のアルゴリズムは条件 (11) をみたす境界をすべて探索する。写像度の計算に寄与する境界がある場合、その境界のすべての境界 (‘枝’) に対して条件 (11) を調べなければならない。この方法は、一般の次元の大きい問題に対してかなりの計算時間を必要とする。次の節では、精度保証付き数値計算の分野でよく用いられる Krawczyk 法を応用して、この計算時間を軽減することを試みる。

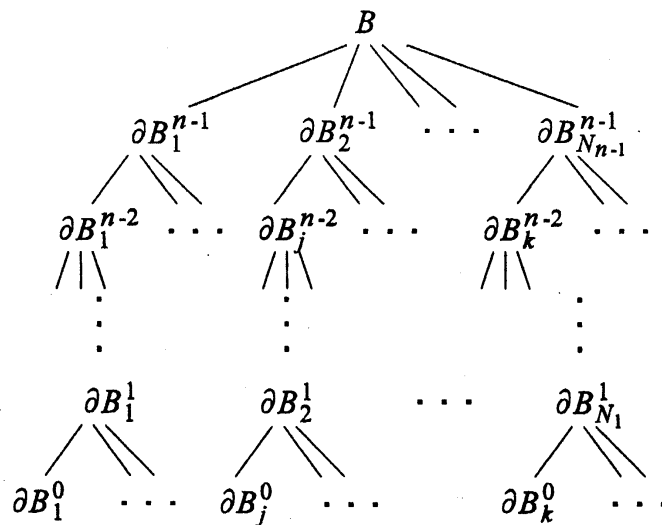


図 1 : 領域 B の境界の集合 $\{\partial B_j^{n-k}\}$.

3 Krawczyk 法を用いた枝刈りによる計算時間の短縮

2 節のアルゴリズムでは、写像度の計算に寄与する境界要素のすべての境界を求めて、最終的には各頂点上の f の値を調べる。そのため、次元の大きな問題に対してはかなりの計算時間が要求される。しかし、もし有向交差数 $I(f(\partial B_j^{n-k}), H_k)$ をある $k = \tilde{k}$ ($1 \leq \tilde{k} \leq n-1$) に対して何らかの方法で求めることができたならば、対応する境界要素より次元の低い境界は探索する必要がない。これは、図 1 の境界要素からなる木構造の集合 $\{\partial B_j^{n-k}\}$ の‘枝刈り’に対応し、計算時間の軽減につながる。この節では、この‘枝刈り’を Krawczyk 法を用いて行うことを考える。

(8) が示すように、有向交差数 $I(f(\partial B_j^{n-k}), H_k)$ は次式の解と関係している。

$$\hat{f}(x) = (f_{k+1}, f_{k+2}, \dots, f_n)(x) = 0 \quad \text{on } \partial B_j^{n-k}, \quad (12)$$

ここで、 $f_1, f_2, \dots, f_k > 0$ on ∂B_j^{n-k} である。もし (12) の解 $\hat{x}$ が ∂B_j^{n-k} 上に唯一つ存在するならば、 $I(f(\partial B_j^{n-k}), H_k)$ は向き $\sigma(\partial B_j^{n-k})$ と $\text{sgn}(\det(\partial \hat{f} / \partial u))$ at $x = \hat{x}$ により決まる。ここで、 $u = (u_1, u_2, \dots, u_{n-k})$ は ∂B_j^{n-k} を表す変数である。Krawczyk 法は (12) の解の一意的な存在を示すために用いることができる。境界 ∂B_j^{n-k} が区間の積 X として表されるとき、 $\hat{f}$ に対する Krawczyk 形式 $G(X)$ は次のように与えられる。

$$G(X) = g(\tilde{x}) + C_X(X - \tilde{x}), \quad (13)$$

ここで、 $g(x) = x - J_{\tilde{x}}^{-1} \hat{f}(x)$, $J_y = (\partial \hat{f} / \partial u)|_{x=y}$, $C_X = I - J_{\tilde{x}}^{-1} J_X$ で、 $\tilde{x}$ は $\hat{f}(x) = 0$ の近似解を表す (たとえば、[10])。このとき、‘枝刈り’のために、Krawczyk 形式 (13) は次のように用いることができる。

補題 2. Krawczyk 形式 $G(X)$ (13) に対して,

$$G(X) \subset X \text{ and } \|C_X\|_\infty < 1, \quad (14)$$

が成り立つとき, 縮小写像の原理より $\hat{f}(x) = 0$ の解 $\hat{x}$ は ∂B_j^{n-k} 上に唯一つ存在する. このとき, 有向交差数 $I(f(\partial B_j^{n-k}), H_k)$ は次式で与えられる.

$$I(f(\partial B_j^{n-k}), H_k) = \sigma(\partial B_j^{n-k}) \cdot \operatorname{sgn} \left(\det \left(\frac{\partial \hat{f}}{\partial u} \right) \Big|_{x=\hat{x}} \right). \quad (15)$$

一方,

$$G(X) \cap X = \emptyset, \quad (16)$$

が成り立つとき, ∂B_j^{n-k} に $\hat{f}(x) = 0$ の解は存在しない. このとき, $I(f(\partial B_j^{n-k}), H_k) = 0$ である. $\square$

(14) あるいは (16) のどちらかが成り立つとき, 対応する境界要素のすべての境界の探索は不要となる. それ以外のとき, すなわち (14) と (16) が両方とも成り立たない場合は, 2 節のアルゴリズムを再び用いる. 次節の数値計算例では, 条件 (14) が成り立つとき, $\hat{f}(x) = 0$ の解 $\hat{x}$ を Newton 法を用いて数値的に求めた.

4 計算例

4.1 例 1

次式で与えられる非線形写像 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ を考える.

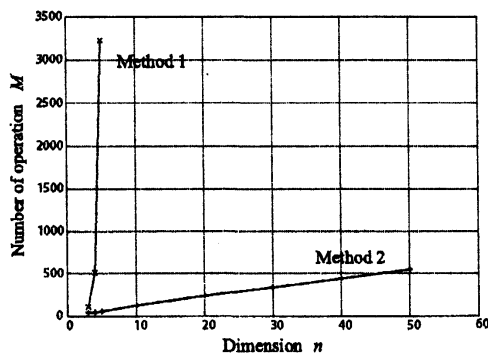
$$\begin{cases} f_1(x) = x_1 + x_2x_2 + 2x_3x_3 + \cdots + (n-1)x_nx_n + c^2 \\ f_2(x) = x_2 + x_1x_2 + 2x_2x_3 + \cdots + (n-1)x_{n-1}x_n \\ \vdots \\ f_n(x) = x_n + x_{n-1}x_2 + 2x_{n-2}x_3 + \cdots + (n-1)x_1x_n, \end{cases} \quad (17)$$

ここで, $x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$. この写像は, 無限水深の水の水面を一定速度 c で一方向に進む進行水波の数学モデルを近似している. x_j ($j = 1, 2, \dots, n$) は水面の形状を Fourier 級数で表したときの Fourier 係数に対応している [11]. 計算結果を体系的にまとめるために, 次式で定義されるパラメータ Q がしばしば用いられる [11].

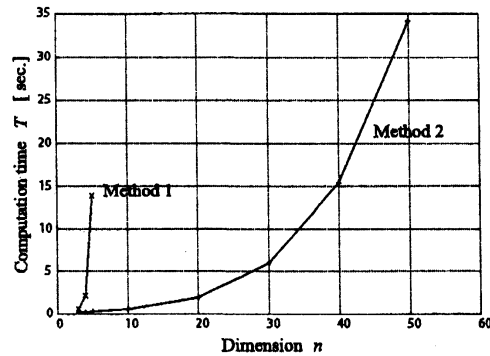
$$Q = 1 + \frac{1}{2}a_0 + \sum_{j=1}^n a_j . \quad (18)$$

このパラメータ Q は物理的には $n \rightarrow \infty$ で $1 - \frac{1}{2}q_0^2$ に対応する (q_0 : 波の山における流体の速度).

図 2 は, 異なる次元 n ($3 \leq n \leq 50$) に対する演算回数 M と計算時間 T をそれぞれ表す. 演算回数 M は条件 (11), (14), (16) を調べた回数を表す. ここで, Q と $B = \prod_{j=1}^n [\tilde{x}_j - w, \tilde{x}_j + w]$ の幅 w は, それぞれ $Q = 0.8$ と $w = 10^{-10}$ に設定している. $f(x) = 0$ の近似解 $\tilde{x} = (\tilde{x}_j)$ は Newton 法を用いて求めた. Jacobi 行列 $A = (\partial f / \partial x)$ at $x = \tilde{x}$ の固有値はすべて実数である. この計算結果から, 3 節の手法は比較的大きな次元 n の問題に対しても有効であることがわかる. ここで, 図 2.(a) の演算回数 M は条件 (11), (14), (16) を調べた回数であり, それらの条件を調べるときに要した四則演算や条件判定の計算量は含まれていないことに注意すべきである. 図 2.(b) の計算時間 T にはすべての演算や判定が含まれているため, 次元にともなう増加の割合が (a) の演算回数 M と比べてかなり大きくなっている.



(a) 演算回数 M



(b) 計算時間 T [sec.]

図 2 : 例 1 (17) の演算回数 M と計算時間 T [sec.] の比較.

M : 条件 (11), (14), (16) を調べた回数. n : 次元.

Method 1: 枝刈りなし, Method 2: 枝刈りあり.

(17) の非線形写像 f がパラメータ Q あるいは c の変化にともない分岐現象を示すことはすでに知られている [11]. 図 3 は, $n = 3$ のときの c^2 と行列式 $\det(\partial f / \partial x)|_{x=\tilde{x}} = \det A$ の関係を表している. ここで, $\tilde{x} = (\tilde{x}_j)$ は (17) の近似解であり, 領域 $B = \prod_{j=1}^n [\tilde{x}_j - w, \tilde{x}_j + w]$ の中心である. 対応する写像度 $\deg(f, 0, B)$ は $\det A < 0$ に対しては -1 , $\det A > 0$ に対しては $+1$ である. この写像度の変化は分岐現象の発生条件として用いられる. $\det A = 0$ における分岐点の付近では, B は (17) の二つの解を含む場合があり, そのとき, 対応する行列式 $\det A$ は異なる符号をもつので, 写像度は $\deg(f, 0, B) = 0$ となる. このような非線形システムの典型的な性質は, 本研究で提案している方法を用いて実用的な時間でもとめることが可能である.

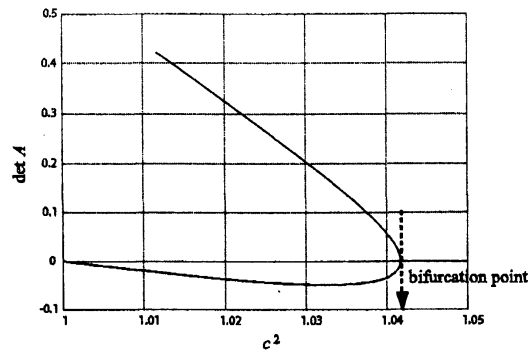
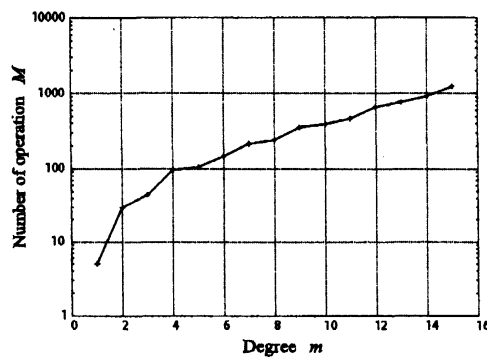
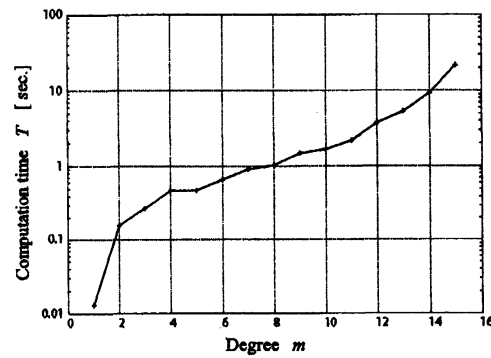


図 3 : 例 1 (17) における $\det A$ とパラメータ c^2 の関係.

$$A = (\partial f / \partial x)|_{x=\bar{x}}, \quad n = 3.$$



(a) 演算回数 M



(b) 計算時間 T [sec.]

図 4 : 例 2 (19) の演算回数 M と計算時間 T [sec.] の比較.

M : 条件 (11), (14), (16) を調べた回数. m : 写像度. 縦軸 : 対数スケール.

4.2 例 2

次の例として, 次式の実部と虚部により与えられる 2 次元写像 $f = (f_1, f_2) : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ を考える.

$$(x_1 + i x_2)^m = f_1(x_1, x_2) + i f_2(x_1, x_2), \quad (19)$$

ここで, i は虚数単位を表す. $f(x) = 0$ の解は $x = 0$ であり, 対応する写像度 $\deg(f, 0, B)$ は $B \ni 0$ のとき m である. 0 は臨界値である,

図 4 は, 2 節のアルゴリズムと 3 節の枝刈りを用いたときの, 演算回数 M と計算時間 T を表す. 写像度 m が大きくなるとともに, 計算量が増加していることがわかる. その

理由は、写像度 m とともにベクトル場が複雑になり、さらに区間演算の過大評価が顕著になるためであると考えられる。

臨界値を含む写像は、正則値のみからなる写像にホモトピー的に変形することができる。このような変形により、図 4 にみられる計算量の増加を軽減できる可能性がある。この点については、今後調べていきたいと考えている。

5 まとめ

C^1 級写像 $f: \bar{B} \rightarrow \mathbb{R}^n$ の正則値 0 に対する写像度 $\deg(f, 0, B)$ を、効率よく求める数値計算法を検討した。基本的なアルゴリズムとしては Aberth の方法を採用した。この方法は写像度を交差数の特別な場合としてとらえ、交差数が境界 ∂B 上の写像の値のみで決まるという性質を利用している。特に、導関数や行列式の計算を必要としないという利点がある。本研究ではこの方法に Krawczyk 法を用いた「枝刈り」を施すことにより、実用的な時間で写像度を求めることを考えた。具体的には、Krawczyk 法を用いて木構造をした境界要素の集合 $\{\partial B_j^{n-k}\}$ を枝刈りしながら探索した。計算例を用いて、提案した手法が比較的大きな次元の非線形問題に対しても有効であることを示した。

今後は、実用的な問題に適用するために、さらに大きな次元で臨界値を含む場合を考える予定である。

参考文献

- [1] J. Cronin, Fixed points and topological degree in nonlinear analysis, Amer. Math. Soc., Providence, RI, 1964.
- [2] W. Guillemin, and A. Pollack, Differential topology, Prentice-Hall, 1974.
- [3] E. Zeidler, Nonlinear functional analysis and its applications I, Fixed-point theorems Springer, 1986.
- [4] E.H. Rothe, Introduction to various aspects of degree theory in Banach spaces, American Mathematical Society, 1986.
- [5] F. Stenger, "Computing the topological degree of a mapping in $\mathbb{R}^n$ ", Numeri. Math., vol.25, pp.23-38, 1975.
- [6] M. Stynes, "A simplification of Stenger's topological degree formula", Numeri. Math., vol.33, pp.147-156, 1979.
- [7] R.B. Kearfott, "An efficient degree-computation method for a generalized method of bisection", Numeri. Math., vol.32, pp.109-127, 1979.

- [8] R.B. Kearfott, J. Dian, and A. Neumaier, "Existence verification for singular zeros of complex nonlinear systems", *SIAM J. Numer. Anal.*, vol.38, no.2, pp.360–379, 2000.
- [9] O. Aberth, "Computation of topological degree using interval arithmetic, and applications", *Mathematics of Computations*, vol.62, no.205, pp.171–178, 1994.
- [10] A. Neumaier, *Introduction to Numerical Analysis*, Cambridge University Press, 2001.
- [11] M.S. Longuet-Higgins, "Bifurcation in gravity waves", *J. Fluid Mech.*, vol.151, pp.457–475, 1985.