

多次元領域におけるゼロ等高超平面通過条件

日大生産工(院)
日大生産工

○茂木 渉
篠原 正明

1. はじめに

非線形方程式の反復解法などにおいて、中間値の定理は極めて重要な理論である。これにより、単変数方程式においては関数の符号を調べることで根の存在の有無を判定できるため、根の探索や囲い込みなどに活用されている。

本論文では、まず、線形と仮定した多変数関数のゼロ等高線（一般にゼロ等高超平面）が矩形領域内（一般に超矩形領域内）を通過する条件を、中間値の定理を N 次元に拡張・一般化することによって示し、それを多変数非線形方程式における根の存在証明に応用することを考案する。

また、領域の端点の要素を表す添字として l と u を用いているが、これらはそれぞれ *lower* と *upper* を意味する（当然ながら、大小関係は $X_l < X_u$ ）。

2. 中間値の定理

中間値の定理 (*intermediate value theorem*) とは、実数の区間に関する、以下のような存在型の定理である。

関数 $f(x)$ が閉区間 $[a, b]$ において連続で、 $f(a) \neq f(b)$ のとき、 $f(a)$ と $f(b)$ の間の値 k に対して $f(c) = k$ ($a < c < b$) となる c が少なくとも1つある。

方程式を解く（根を探索する）場合には、次のように $k = 0$ と置く。

関数 $f(x)$ が閉区間 $[a, b]$ において連続で、 $f(a)$ と $f(b)$ が異符号ならば、 a と b の間に $f(c) = 0$ となる c が少なくとも1つある。

3. 平面・空間における通過条件

まず、2次元及び3次元の領域内をゼロ等高線・ゼロ等高超平面が通過する条件について考察する。ここでは前述のとおり、関数は線形を仮定している。

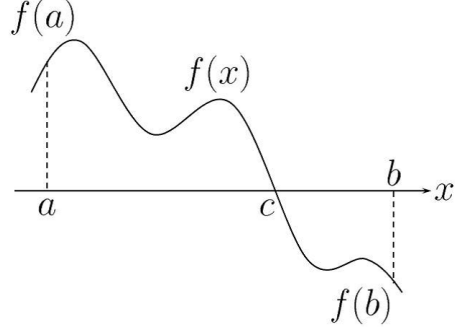


図 1. 中間値の定理

3.1. 2次元領域における通過条件

2次元矩形閉領域 $[x_l, x_u] \times [y_l, y_u] \in \mathbb{R}^2$ における各端点を図2のように設定する。

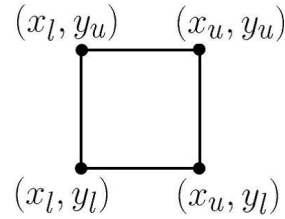


図 2. 2次元領域における端点位置

この領域内を2変数関数 $f(x, y)$ のゼロ等高線が通過するパターンを考えると、図3からわかるように、 $3! = 6$ 通りしか存在しない。

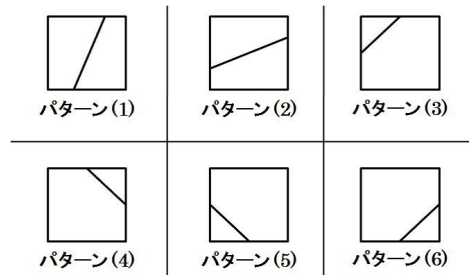


図 3. ゼロ等高線通過パターン

それぞれのパターンにおいて関数の値とその符号の変化を考えると、パターン (1),(2) はパターン (3)~(6) の組み合わせでカバーできる (即ち、(3) または (6) 及び (4) または (5) に退化している) と容易に想像がつく。これより、次のことが予想できる。

[予想 1]

2 次元矩形閉領域 $[x_l, x_u] \times [y_l, y_u] \in \mathbb{R}^2$ に対し、

$$\begin{cases} f(x_l, y_l) \cdot f(x_u, y_u) < 0 \\ f(x_l, y_u) \cdot f(x_u, y_l) < 0 \end{cases} \quad (1)$$

のどちらかが成り立つならば、関数 $f(x, y)$ のゼロ等高線 $f(x, y) = 0$ は領域内を通過する。

3.2. 3 次元領域における通過条件

3 次元超矩形閉領域 $[x_l, x_u] \times [y_l, y_u] \times [z_l, z_u] \in \mathbb{R}^3$ における各端点を図 3 のように設定する。

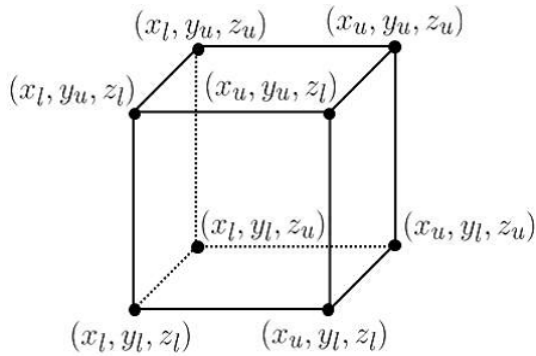


図 4. 3 次元領域における端点位置

3 次元においても 2 次元と同じように考える。つまり関数のゼロ等高平面を領域の切り口とし、領域を 2 つに分割すると考えれば、全ての分割パターンは端点の個数を 1 : 7 に分割するパターンの組み合わせに帰着させることができると直感的に思いつくであろう。よって以下のような予想がつく。

[予想 2]

3 次元超矩形領域 $[x_l, x_u] \times [y_l, y_u] \times [z_l, z_u] \in \mathbb{R}^3$ において、

$$\begin{cases} f(x_l, y_l, z_l) \cdot f(x_u, y_u, z_u) < 0 \\ f(x_l, y_l, z_u) \cdot f(x_u, y_u, z_l) < 0 \\ f(x_l, y_u, z_l) \cdot f(x_u, y_l, z_u) < 0 \\ f(x_l, y_u, z_u) \cdot f(x_u, y_l, z_l) < 0 \end{cases} \quad (2)$$

のいずれかが成り立つならば、関数 $f(x, y, z)$ のゼロ等高平面 $f(x, y, z) = 0$ は領域内を通過する。

4. N 次元領域における通過条件

[予想 1, 2] から一般化した場合の条件を考察すると、領域のある端点とそこから最も離れた位置にある端点の符号を調べていけば、ゼロ等高超平面が通過するかどうかを判断することができると考えられる。これを踏まえて N 次元ゼロ等高超平面通過条件を定式化する。

4.1. 対角要素の定義

本論文では、ある端点とそこから最も離れた位置にある端点を、互いに「対角要素」と表現する。

[定義 1]

N 次元超矩形領域における任意の端点 $i (0 \leq i \leq 2^N - 1)$ の対角要素は端点 $2^N - i - 1$ とし、端点 i における関数の値 f_i を

$$f_i := f(\mathbf{x}_i) \quad (0 \leq i \leq 2^N - 1) \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_i &= (x_{1\phi_1}, x_{2\phi_2}, \dots, x_{k\phi_k}, \dots, x_{N\phi_N}) \\ (\phi_k &= \{l \text{ or } u\}, k = 1, 2, \dots, N) \end{aligned} \quad (4)$$

とすると、対角要素の関数の値 f_{2^N-i-1} は、 f_i における全ての l と u を入れ替えた値となる。

4.2. 隣接要素の定義

ある端点について、1 辺を挟んで存在する端点を、互いに「隣接要素」と表現する。

[定義 2]

N 次元超矩形領域における任意の端点 $i (0 \leq i \leq 2^N - 1)$ の関数の値 f_i を (3), (4) 式で表すならば、隣接要素の関数の値は、 l と u を k 番目ただ 1 つのみ入れ替えた値となる。これより、N 次元領域における端点 i の隣接要素は N 個存在することになる。

4.3. N 次元領域への一般化

対角要素と隣接要素の定義を用いて、3 章の条件を N 次元に拡張し、その証明を行う。

[定理]

N 次元超矩形領域 $[x_{1l}, x_{1u}] \times [x_{2l}, x_{2u}] \times \dots \times [x_{Nl}, x_{Nu}] \in \mathbb{R}^N$ において、端点 i とその対角要素 $2^N - i - 1$ の超平面関数 $f(\mathbf{x})$ の値が異符号となる組み合わせが少なくとも 1 組存在する、つまり、

$$f_i \cdot f_{2^N-i-1} < 0 \quad (i = 0, 1, \dots, 2^{N-1} - 1) \quad (5)$$

となる組み合わせが少なくとも 1 組存在するならば、ゼロ等高超平面 $f(\mathbf{x}) = 0$ が通過する。

[補題 1]

ある端点 i と最も離れた位置とは, i における全ての l と u を入れ替えた位置である.

[補題 2]

関数 $f(x)$ が線形ならば, 中間値の定理は必要十分条件である.

[補題 1-証明]

距離空間をユークリッド距離で考えると, ある端点 i と最も離れた位置とは, 距離が最大のものを意味するので,

$$\left(\sum_{k=1}^N \Delta x_k^2 \right)^{1/2} \rightarrow \max \quad (6)$$

また, k 次元における 2 点間の距離の二乗 Δx_k^2 は

$$\Delta x_k^2 = \begin{cases} (x_{ku} - x_{kl})^2 & (k \text{ 次元の座標が異なる}) \\ 0 & (k \text{ 次元の座標が同じ}) \end{cases} \quad (7)$$

であるから, (6) 式を満たす端点 (対角要素) とは, i との距離が全次元において $\Delta x_k^2 \neq 0$ となるものである. よって, 全ての座標が i とは異なる ($l \leftrightarrow u$) ようにしたものに相当する. ■

[補題 2-証明]

閉区間 $[a, b]$ において, $f(c) = 0$ となる c が存在すると仮定すれば, 線形関数 $f(x)$ は 2 点 $[a, f(a)]$, $[c, f(c)]$ を通る直線の方程式から

$$f(x) - f(a) = \frac{0 - f(a)}{c - a}(x - a) \quad (8)$$

で決定でき, $x = b$ を代入すると,

$$f(b) = f(a) \left\{ 1 - \frac{b - a}{c - a} \right\} \quad (9)$$

従って, $f(b)$ の符号は $f(a)$ の符号と恒等的に反対になる. ■

[定理-証明 1]

(5) 式が成り立つ組み合わせがあるならば, ゼロ等高超平面が通過することを示す.

端点 p とその対角要素を通るような直線を主軸 t と考える. $t := x$ と座標変換をし, $f_p := f(t_1)$, $f_{2^N-p-1} := f(t_2)$ と置くことで, t に関する 1 次元中間値の定理から[定理]がゼロ点が存在する.

いま, 関数 $f(x)$ は線形である (連続でもある) から, 座標系を逆変換することでゼロ点はゼロ等高超平面となる. ■

[定理-証明 2]

ゼロ等高超平面が通過するならば, (5) 式が成り立つ組み合わせが存在することを証明する.

N 次元超矩形領域 $[x_{1l}, x_{1u}] \times [x_{2l}, x_{2u}] \times \cdots \times [x_{Nl}, x_{Nu}] \in \mathbb{R}^N$ において, 超平面関数

$$f(x) = a_1 x_1 + a_2 x_2 + \cdots + a_N x_N + b \quad (10)$$

のゼロ等高超平面が通過する場合を考え, このとき (5) 式が成り立たないと仮定する.

いま, 任意の端点 p とその k 次元での隣接要素 q との間で関数のゼロ点が存在するとき, [補題 2] と仮定から, 以下の関係不等式が得られる.

$$\begin{cases} f_p \cdot f_q < 0 \\ f_p \cdot f_{2^N-p-1} > 0 \\ f_q \cdot f_{2^N-q-1} > 0 \end{cases} \quad (11)$$

(i) $f_p > 0$ とする.

このとき (11) の関係不等式から各端点の関数の符号が次のように決定される.

$$\begin{cases} f_q < 0 \\ f_{2^N-p-1} > 0 \\ f_{2^N-q-1} < 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} -f_q > 0 \\ f_{2^N-p-1} > 0 \\ -f_{2^N-q-1} > 0 \end{cases} \quad (12)$$

これらのことから,

$$f_p + (-f_q) > 0 \quad (13)$$

$$f_{2^N-p-1} + (-f_{2^N-q-1}) > 0 \quad (14)$$

(13) 式に注目すると, f_p と f_q は k 次元での隣接要素であるため, ϕ_k を端点 p の k 次元における l, u を表す関数とすると,

$$a_k(x_{kl} - x_{ku}) > 0 \quad (\phi_k = l) \quad (15)$$

$$a_k(x_{ku} - x_{kl}) > 0 \quad (\phi_k = u) \quad (16)$$

$x_{kl} < x_{ku}$ より,

$$a_k < 0 \quad (\phi_k = l) \quad (17)$$

$$a_k > 0 \quad (\phi_k = u) \quad (18)$$

一方, (14) 式に注目すると, f_{2^N-p-1} と f_{2^N-q-1} も k 次元での隣接要素であり, f_p 及び f_q とはそれぞれ全ての l と u が逆転しているため,

$$a_k(x_{ku} - x_{kl}) > 0 \quad (\phi_k = l) \quad (19)$$

$$a_k(x_{kl} - x_{ku}) > 0 \quad (\phi_k = u) \quad (20)$$

同じく, $x_{kl} < x_{ku}$ より,

$$a_k > 0 \quad (\phi_k = l) \quad (21)$$

$$a_k < 0 \quad (\phi_k = u) \quad (22)$$

$\phi_k = l$ のときは (17),(21) 式, $\phi_k = u$ のときは (18),(22) 式でそれぞれ矛盾を起こすことがわかる.

(ii) $f_p < 0$ とする.

同様に (11) の関係不等式を用いると, (i) とは単純に不等号の向きが反対になるだけなので, 最終的に (17),(18),(21),(22) 式と同じ矛盾が導かれる.

(i),(ii) より, ある端点 p と任意の次元における隣接要素 q の間で関数のゼロ等高超平面が通過するならば, p または q とそれぞれの対角要素とで同符号となってしまうと矛盾が生じることを示した. よって仮定は誤りであり, p とその対角要素もしくは q とその対角要素のどちらかが異符号の組とならなければならない.

ここで, k は任意の次元, 端点 p は任意の点であるから, 全ての場合について, 以上の矛盾が生じることになる.

従って, 超矩形領域内を超平面関数のゼロ等高超平面が通過するとき, ある端点とその対角要素の関数の値が異符号である組み合わせが少なくとも 1 組は存在する. ■

5. 非線形方程式系への応用

これまでは多変数線形関数のゼロ等高超平面が領域内を通過する条件を示してきた. では, 多変数非線形関数のゼロ等高超曲面ではどうだろうか. 残念ながら非線形の場合, [定理]は必ずしも成り立つとは限らない.

5.1. 非線形系における条件

[定理]が成り立たない非線形関数は, 多次元以前に 1 次元のときにも存在するので, 反例を挙げるのは簡単である. 例えば重根を持つ (もしくは同一関数の複数のゼロ等高超曲面が限りなく近い位置にあるそれに近い位置にある) 場合などには, 区間 (領域) の端点同士で同符号となり, ゼロ点はあるが異符号とはならない. つまり, 関数が線形ならば, [定理]は必要十分条件であるが, 関数が非線形るとき, 十分条件であるが必要条件ではない ([証明 2] は対角要素が鍵であることを示したといえる).

5.2. 非線形連立方程式の根の簡易型自動探索法

自動探索とは中間値の定理に基づき, 根を上下 (2 点の関数の値の符号を正と負) に囲い込む作業をコンピュータで自動的に処理させることを指す.

非線形連立方程式の根の自動探索をするにあたって, 以下のような 2 つの近似を考える.

I. 区分線形近似

「非線形の世界も極く小さな領域だけを見れば, ほぼ線形の世界である」という数学の一般原理に基づき, 探索領域を限りなく細かく分割すれば, ゼロ等高超曲面はゼロ等高超平面であると見做す近似.

II. 交叉近似

限りなく細かく分割された領域内で, 複数のゼロ等高超曲面 (超平面) が同時に通過していれば, それらは交叉していると見做す近似.

これらの近似を導入し, 連立方程式の根の自動探索アルゴリズムを簡単に示す.

探索領域 $(x_{\min}, x_{\max})$ 及び探索間隔 Δx を与え,

$$x_{1l} = x_{1\min} + k_1 \Delta x_1 \quad (k_1 = 1, 2, \dots)$$

$$x_{1u} = x_{1l} + \Delta x_1$$

$$x_{2l} = x_{2\min} + k_2 \Delta x_2 \quad (k_2 = 1, 2, \dots)$$

$$x_{2u} = x_{2l} + \Delta x_2$$

⋮

$$x_{Nl} = x_{N\min} + k_N \Delta x_N \quad (k_N = 1, 2, \dots)$$

$$x_{Nu} = x_{Nl} + \Delta x_N$$

領域の端点において $f(x)$ を計算し, 通過条件を調べ, 全ての関数が同時に通過すると判断したのならば, 領域 $[x_{1l}, x_{1u}] \times [x_{2l}, x_{2u}] \times \dots \times [x_{Nl}, x_{Nu}]$ を詳しく探索し, 全ての領域を探索したならば終了する.

6. おわりに

多変数非線形連立方程式は, 根の存在や個数が不明瞭であること, 様々な問題に適用できる一般的な解法がないことから, 実際に解くことは 1 次元の非線形方程式以上に困難である. しかし, 非線形性が弱い・根の近似値がわかっているなどの有利な条件があることにより, 現実に問題が解かれている. 本論文ではこれらのこと, 特に前者に注目し, 線形方程式系におけるゼロ等高超平面の領域内通過条件を理論的に示し, 非線形方程式系に応用することを提案した.

関数評価とそれらの積のみで根の存在性を判断するので, 信頼性の面では高いとは言えないが, 考え方自体は簡単であり, プログラミングも容易である (本自動探索法を簡易型と称しているのはそのためである). また, 微係数を必要としないため, 微分不可・不連続関数を含む方程式にも適用可能であり, 領域を格子網で覆っているため並列計算も可能であるといえる.