

非線形システムの数値解析法の開発とその応用に関する研究

研究代表者 研究員 山村 清隆 (中央大学理工学部電気電子情報通信工学科)

共同研究者 研究員 小林 一哉 (中央大学理工学部電気電子情報通信工学科)

1 はじめに

本研究では、大規模集積回路網をはじめとする非線形システムの新しい数値解析法の開発とその応用に関する研究を行った。特に、産業界や他分野の研究者との共同研究を通じて非線形数値解析法の研究を広い範囲で展開し、工学の様々な分野で新しいアルゴリズムの開発とその応用並びに実用化に関する研究を行ってきた。

この1年間に行った研究は以下の三つに大別される。

1. 大規模集積回路網の大域的求解法の開発とその実用化に関する研究
2. 高分子溶液の多相平衡の計算と実験による検証に関する研究
3. 非線形回路のすべての解を求めるアルゴリズムに関する研究

1. については、LSI 設計における大きなボトルネックとして世界中の設計者を悩ませていた「非収束問題」に対し、ホモトピー法を用いた収束性の高いアルゴリズムを開発し、その大域的収束性を証明した。さらに企業との共同研究により、パイポーラアナログ回路としては最大級の1万素子クラスのLSIを世界で初めて収束の保証付きで解くことに成功した¹。また欧米で使われているホモトピー法の回路シミュレータに対して、プログラムのある部分に-1を付けることにより大域的収束性が保証されることを証明し、その収束性を飛躍的に改善するなど、国内外で「非収束問題」を理論面・実用面の両方から解決した^{[1]-[4]}。

2. については、物理化学の研究者との共同研究により、難解なことで有名な高分子溶液の多相平衡の計算問題に対し、その解を精密に求めることのできる新しいアルゴリズムを開発した。またこのアルゴリズムを用いて、「3重臨界面近傍における3相平衡のメカニズムの解明」、「圧力の変化により3相共存曲線が(通常知られている)S字型とは異なる形状をとる場合があることの発見」、「リエントラント3相平衡の発見とその実験的検証」など、様々な興味深い現象の予測や解明を行った^{[5]-[8]}。また、実在する系に対して4相平衡の計算に

世界で初めて成功した^[9]。

3. については、LSI 設計における重要な未解決問題として知られている「非線形回路のすべての解を求めるアルゴリズムの開発」に対し、線形領域数 10^{200} の超大規模問題の全解探索を実用時間内で行うことのできる非常に効率のよいアルゴリズムを提案するとともに、より一般的な非線形方程式の全解探索問題への拡張を行った^{[10]-[22]}。

本稿では、3. で提案した全解探索法を応用した非線形境界値問題の新しい全解探索アルゴリズムを提案し、数値実験によりその有効性を検証する。

2 非線形境界値問題の全解探索法

本稿では、次のような非線形境界値問題の全解探索法について考察する。

$$\nabla^2 u = F(u) \text{ in } \Omega, \quad u \in B \text{ on } \Gamma \quad (1)$$

ただし、 ∇^2 はラプラシアン、 F は非線形関数、 Ω は R^N における有界領域、 Γ はその境界、 $u \in B$ は境界条件とする。波動の伝搬・散乱問題など多くの問題がこのような方程式により記述される。

まず、式(1)を差分方程式で記述する。次に、差分近似の精度に合わせて非線形関数 F を区分的線形近似する。その結果得られる区分的線形方程式系を

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \\ &\vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \end{aligned} \quad (2)$$

あるいはベクトル表示により

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad (3)$$

で表すことにする。

ここで、非線形関数 F は K 本の線分からなる区分的線形関数で近似されるものとする。以下、 f が線形となるような領域を線形領域と呼ぶ。 f は分離可能であるから、線形領域は n 次元直方体の形状をとり、また線形領域の総数は K^n となる。本論文では、初期領域 $D \subset R^n$ 内に存在する式(2)のすべての解を求める問題を考え

¹この研究により、共同研究者の三洋電機・井上靖秋部長は1999年度の科学技術庁長官賞を受賞されている。またこの研究の成功を大きな要因の一つとして、早稲田大学の堀内和夫名誉教授も1998年度の科学技術庁長官賞を受賞されている。

る。ただし、 D は K^n 個の線形領域からなる直方体領域とする。

式 (1) のすべての解を求めるには、すべての線形領域上で対応する線形方程式を解けばよいが、この方法では n の増加とともに計算時間は爆発的に増大する。そこで、複数の線形領域からなる直方体領域（これを超領域あるいは単に領域と呼ぶことにする）を考え、解の存在しない超領域を LP テスト^[10]により除去することを考える。LP テストとは与えられた領域の中に方程式の解が存在しないことを線形計画法（単体法）を用いて確認するもので、このテストを用いて解の存在領域を絞り込んでいくことにより、非常に効率よくすべての解を求めることができる。

式 (1) では、関数 f_i は変数 x_i だけに関して区分的線形で、他の変数に関しては線形となる。従ってもし初期領域 D を $x_i (i=1, 2, \dots, k)$ 方向に線分レベルまで（すなわち対応する区分的線形関数が線形関数になるまで）分割すれば、 $f_i (i=1, 2, \dots, k)$ はそれぞれの超領域上で線形となる。そのような超領域の一つを

$$X = \{x \in R^n \mid a_i \leq x_i \leq b_i, i = 1, 2, \dots, n\} \quad (4)$$

とする。LP テストでは、領域 X 内で方程式 $f_i(x) = 0 (i=1, 2, \dots, k)$ の解曲面〔実際には $(n-1)$ 次元超平面となる〕が交わっているか否かを、線形計画問題

最大化または最小化： $f_k(x)$

制約条件：

$$\begin{aligned} f_i(x) &= 0 & i &= 1, 2, \dots, k-1 \\ a_i &\leq x_i \leq b_i & i &= 1, 2, \dots, n \end{aligned} \quad (5)$$

を単体法²で解くことにより確認する（ただし、不等式制約 $a_i \leq x_i \leq b_i, i = 1, 2, \dots, n$ はそのときどきの超領域を表すものとする）。すなわち、まずフェーズ I により実行可能領域の存在・非存在を調べ、存在する場合（実行可能領域の端点の一つを見つけた場合）は、その端点における目的関数の値が負なら最大化問題 (5) を、正なら最小化問題 (5) をフェーズ II で解く。もしその領域内で実行可能領域と $f_k(x) = 0$ の解曲面が交わっているなら、目的関数 $f_k(x)$ の最大値は正、最小値は負となる。そうでない超領域には解は存在しないので、それを除去する。

文献[10]の LP テストアルゴリズムは、与えられた初

²単体法は線形計画法の代表的手法の一つで、フェーズ I とフェーズ II により構成される。フェーズ I では、人為変数を用いて実行可能領域の端点を求める。フェーズ II では、その端点から出発して隣接する端点を次々と探索し、最適解を求める。もし実行可能領域が存在しなければ、単体法のフェーズ I はその情報とともに終了する。

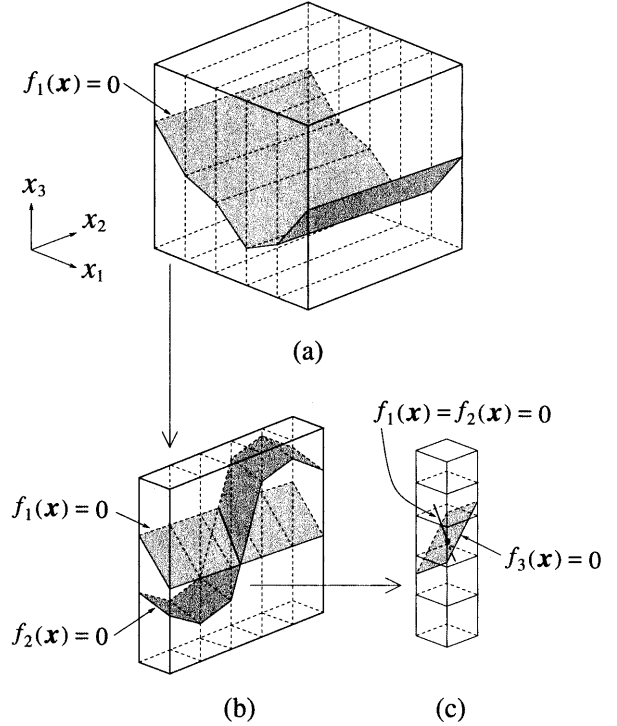


図1 アルゴリズムの概要

期領域 D を図 1 に示すように各変数方向に線分レベルまで分割し、各領域内で解曲面どうしが交わっているか否かを LP テストにより確認しながら、解の存在領域を絞り込んでいく方法である。なおこのアルゴリズムに対しては、LP テストにおけるピボット演算回数を激減させる手法が提案されている^[10]。この手法の導入により、1 領域当たりの平均ピボット演算回数を 1~2 回程度におさえることができるため、LP テストは強力であると同時に極めて効率的となる。

3 数値例

本章では、数値実験結果をいくつか示し、提案したアルゴリズムの有効性を検証する。なお、使用計算機は Sun Ultra 10 (360MHz)、プログラミング言語は C である。

Bratu 問題の名で知られる次のような非線形 2 点境界値問題を考える。

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} + \exp(x(t)) = 0, \quad x(0) = x(1) = 0$$

この問題を記述する差分方程式は次のようになる。

$$x_{i-1} - 2x_i + x_{i+1} + h^2 \exp(x_i) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

ただし、 $x_0 = x_{n+1} = 0, h = 1/(n+1)$ とする。

この方程式に現われる指数関数を区間 $[0, 5]$ 上で K 本の線分からなる区分的線形関数で近似し、その結果得ら

れる区分的線形方程式に対して、 n と K の値をいろいろ変えながら本手法を適用したときの結果を示す。

表 1 は、 K の値を 10 に固定し、 n の値を 10 から 300 まで変えたときの結果である。ただし、 L は線形領域の数、 S は得られた解の個数、 T は本手法の計算時間を表す。この表より、 $n=300$ 、 $L=10^{300}$ という大規模問題の全解探索を実用時間内で行うことに成功していることがわかる。

また表 2 は、 n の値を 100 に固定し、 K の値を 10 から 300 まで変えたときの結果である。この表より、計算時間は K に大体比例している（すなわち、差分近似の精度を高くしても計算時間は指数関数的には増大しない）ことがわかる。

また表 3 は、差分近似の精度と区分的線形近似の精度が同じオーダーであることから、 $n=K$ としてその値を 10 から 200 まで変えたときの結果である。この表より、線形領域数 $200^{200} \simeq 1.6 \times 10^{460}$ という大規模問題の全解探索にも成功していることがわかる。

他の例題からも同様の結果を得ることができた。これらの結果から、本手法の有効性を確認することができ

表 1 本手法の計算時間 ($K=10$)

| n | L | S | T (秒) |
|----------|------------|----------|----------|
| 10 | 10^{10} | 2 | 0.03 |
| 20 | 10^{20} | 2 | 0.27 |
| 30 | 10^{30} | 2 | 1 |
| 40 | 10^{40} | 2 | 4 |
| 50 | 10^{50} | 2 | 10 |
| 60 | 10^{60} | 2 | 20 |
| 70 | 10^{70} | 2 | 38 |
| 80 | 10^{80} | 2 | 67 |
| 90 | 10^{90} | 2 | 107 |
| 100 | 10^{100} | 2 | 163 |
| 110 | 10^{110} | 2 | 240 |
| 120 | 10^{120} | 2 | 340 |
| 130 | 10^{130} | 2 | 481 |
| 140 | 10^{140} | 2 | 635 |
| 150 | 10^{150} | 2 | 870 |
| 160 | 10^{160} | 2 | 1,127 |
| 170 | 10^{170} | 2 | 1,496 |
| 180 | 10^{180} | 2 | 1,791 |
| 190 | 10^{190} | 2 | 2,368 |
| 200 | 10^{200} | 2 | 2,813 |
| \vdots | \vdots | \vdots | \vdots |
| 300 | 10^{300} | 2 | 15,716 |

表 2 本手法の計算時間 ($n=100$)

| K | L | S | T (秒) |
|----------|-------------|----------|----------|
| 10 | 10^{100} | 2 | 163 |
| 20 | 20^{100} | 2 | 355 |
| 30 | 30^{100} | 2 | 536 |
| 40 | 40^{100} | 2 | 719 |
| 50 | 50^{100} | 2 | 905 |
| 60 | 60^{100} | 2 | 1,061 |
| 70 | 70^{100} | 2 | 1,275 |
| 80 | 80^{100} | 2 | 1,440 |
| 90 | 90^{100} | 2 | 1,626 |
| 100 | 100^{100} | 2 | 1,783 |
| \vdots | \vdots | \vdots | \vdots |
| 200 | 200^{100} | 2 | 3,620 |
| \vdots | \vdots | \vdots | \vdots |
| 300 | 300^{100} | 2 | 5,456 |

表 3 本手法の計算時間 ($n=K$)

| n | K | L | S | T (秒) |
|----------|----------|-------------|----------|----------|
| 10 | 10 | 10^{10} | 2 | 0.03 |
| 20 | 20 | 20^{20} | 2 | 0.55 |
| 30 | 30 | 30^{30} | 2 | 3 |
| 40 | 40 | 40^{40} | 2 | 18 |
| 50 | 50 | 50^{50} | 2 | 56 |
| 60 | 60 | 60^{60} | 2 | 138 |
| 70 | 70 | 70^{70} | 2 | 306 |
| 80 | 80 | 80^{80} | 2 | 603 |
| 90 | 90 | 90^{90} | 2 | 1,048 |
| 100 | 100 | 100^{100} | 2 | 1,783 |
| \vdots | \vdots | \vdots | \vdots | \vdots |
| 150 | 150 | 150^{150} | 2 | 14,197 |
| \vdots | \vdots | \vdots | \vdots | \vdots |
| 200 | 200 | 200^{200} | 2 | 61,163 |

る。

4 おわりに

本稿では、文献[10]のアルゴリズムを応用したあるクラスの非線形境界値問題の新しい全解探索法を提案した。また本手法により $n=300$ 、 $L=10^{300}$ という大規模問題の全解探索を実用時間内で行えることを示した。

参 考 文 献

- [1] 山村清隆, “理論が実用になるまで,” 電子情報通信学会誌, vol.81, no.1, pp.33-36, 1998.

- [2] K. Yamamura, T. Sekiguchi, and Y. Inoue, "A fixed-point homotopy method for solving modified nodal equations," IEEE Trans. Circuits and Systems-I, vol.46, no.6, pp.654-665, 1999.
- [3] 山村清隆, 高橋重憲, "不動点ホモトピーを用いた修正節点方程式の大域的求解アルゴリズム," 中央大学理工学研究所論文集, vol.5, pp.89-97, 1999.
- [4] 西原明法, 鹿毛哲郎, 奥村万規子, 山村清隆, "ポスト SPICE 回路シミュレータ," 電子情報通信学会誌, vol.82, no.1, pp.47-54, 1999.
- [5] 山村清隆, 土橋敏明, 稲熊雄一, 蓬田幸二, 近藤千夏, "ホモトピー法による高分子溶液の多相平衡の計算," 電子情報通信学会論文誌 (A), vol.J81-A, no.3, pp.456-460, 1998.
- [6] M. Nakata, T. Dobashi, Y. Inakuma, and K. Yamamura, "Coexistence curve of polystyrene in methylcyclohexane. X.Two-phase coexistence curves for ternary solutions near the tricritical compositions," Journal of Chemical Physics, vol.111, no.14, pp.6617-6624, 1999.
- [7] M. Suzuki, T. Dobashi, Y. Mikawa, K. Yamamura, and M. Nakata, "Reentrant three-phase equilibrium of homologous polystyrene solution," Journal of the Physical Society of Japan, vol.69, no.6, pp.1741-1744, 2000.
- [8] Y. Mikawa, T. Dobashi, K. Yamamura, and M. Nakata, "Phase diagram of polystyrene in cyclohexane in ϕ - T - P space," Trans. Materials Research Society of Japan, vol.25, no.3, pp.757-758, 2000.
- [9] 山村清隆, 三川敬久, 土橋敏明, "ホモトピー法による高分子溶液の多相平衡の計算 II," 電子情報通信学会論文誌 (A) 投稿中。
- [10] K. Yamamura and T. Ohshima, "Finding all solutions of piecewise-linear resistive circuits using linear programming," IEEE Trans. Circuits and Systems-I, vol.45, no.4, pp.434-445, 1998.
- [11] K. Yamamura, H. Kawata, and A. Tokue, "Interval solution of nonlinear equations using linear programming," BIT, vol.38, no.1, pp.186-199, 1998.
- [12] 山村清隆, 本田英之, "改良符号テストを用いた区分的線形回路の全解探索," 電子情報通信学会論文誌 (A), vol.J82-A, no.7, pp.997-1004, 1999.
- [13] K. Yamamura and M. Nishizawa, "Finding all solutions of a class of nonlinear equations using an improved LP test," Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, vol.16, no.3, pp.349-368, 1999.
- [14] 山村清隆, 酒井健司, "線形計画法を用いた抵抗回路の変動解析," 電子情報通信学会論文誌 (A), vol.J82-A, no.10, pp.1672-1675, 1999.
- [15] K. Yamamura, "Finding all solutions of nonlinear equations using linear combinations of functions," Reliable Computing, vol.6, no.2, pp.105-113, 2000.
- [16] K. Yamamura and S. Tanaka, "Finding all solutions of piecewise-linear resistive circuits using the dual simplex method," Proc. IEEE Int. Symp. Circuits & Syst., vol.IV, pp.165-168, 2000.
- [17] 山村清隆, フィトラグナワン, 蓬田幸二, "線形計画法を用いた非線形抵抗回路の特性曲線の探索," 電子情報通信学会論文誌 (A), vol.J83-A, No.6, pp.761-770, 2000.
- [18] K. Yamamura and K. Yomogita, "Finding all solutions of piecewise-linear resistive circuits using an LP test," IEEE Trans. Circuits and Systems-I, vol.47, no.7, pp.1115-1120, 2000.
- [19] 山村清隆, 田中茂, "線形計画法を用いた区分的線形回路の全解探索法," 電子情報通信学会論文誌 (A), vol.J83-A, no.8, pp.965-975, 2000.
- [20] 山村清隆, 金子隆児, 蓬田幸二, "2 種類の LP テストを併用した区分的線形回路の全解探索法," 電子情報通信学会論文誌 (A), vol.J83-A, no.10, pp.1223-1226, 2000.
- [21] K. Yamamura and S. Tanaka, "Performance evaluation of the LP test algorithm for finding all solutions of piecewise-linear resistive circuits," International Journal of Circuit Theory and Applications, vol.28, no.5, pp.223-231, 2000.
- [22] K. Yamamura and Y. Hata, "Finding all solutions of weakly nonlinear equations using linear programming," IEICE Trans. Fundamentals, vol.E83-A, no.12, 2000.