

連立代数方程式の数値解法における初期値探索の 5 D - 5 効率化について*

鈴木秀男

東京職業能力開発短大・情報処理[†]

飯嶋慎一

品川技術専門校・情報処理[‡]

1. はじめに

連立代数方程式の数値解法においてニュートン法を適用する場合、その初期値は根の十分近くに与えるほど効率的である。しかし、連立代数方程式が複数の根をもつ場合には、全ての初期値を根に十分近づけて与えるのは難しい。しかし、遺伝的アルゴリズムを利用すれば、比較的簡単に複数の初期値を探索することができるのではないかと考えた。筆者らはすでに、遺伝的アルゴリズムを利用して複数の初期値の発見に成功している¹⁾。

今回は、初期値探索をより効率的に行う方法について検討した。この結果、計算時間の大幅な短縮が図れ、さらに発見できる初期値数も増加した。本報告では、遺伝的アルゴリズムによる初期値探索の効率化について述べる。

2. 連立代数方程式の数値解法

次のような問題を考える。

[問題]

$x = (x_1, \dots, x_n) \in C^n$ のとき

$$f(x) = \begin{pmatrix} f_1(x) \\ \vdots \\ f_n(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(x_1, \dots, x_n) \\ \vdots \\ f_n(x_1, \dots, x_n) \end{pmatrix} = 0 \quad (1)$$

の数値解を求める。

式(1)を解くニュートン法は

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - J(x^{(k)})^{-1} f(x^{(k)}) \quad (2)$$

$$J = \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

で与えられる²⁾。

このとき、 $f_i(x) (1 \leq i \leq n)$ が C^2 級で $J(\alpha)$ が正則ならば、式(1)の解 α の十分近くから出発するニュートン法は α に 2 次収束する。計算手順は以下に従う。

*Efficiency improvement to search of initial values in numerical solution for a system of algebraic equations

[†]Hideo Suzuki, Tokyo Polytechnic College, 2-32-1 Ogawashi Kodaira Tokyo 187-0035 Japan

[‡]Shin-ichi Iijima, Shinagawa Technical School, 3-31-16 Higashi-shinagawa Shinagawa Tokyo 140-0002 Japan

$k = 0, 1, 2, \dots$ のとき

1. $h = (h_1, \dots, h_n)$ に関する連立方程式

$$J(x^{(k)})h = -f(x^{(k)})$$

を h について解く。これにより直接 $J(x^{(k)})^{-1}$ の計算を省略できる。

2. $x^{(k+1)} = x^{(k)} + h$ とおく。

3. $k+1$ を新しい k として 1. に戻る。

そして、 ε を十分小さな正の数値としたとき、 $|h| \leq \varepsilon$ となったら計算を終了する。

ニュートン法で式(1)を解く場合、その計算効率と全ての解の発見には、そこに与える初期値が大きく寄与している。

このことから、遺伝的アルゴリズムによりニュートン法に与える初期値の探索を試みてきた。

3. アルゴリズム

遺伝的アルゴリズムは、生物の進化に着目したアルゴリズムであり最適化手法の 1 つとされている^{3), 4)}。これにより、式(2)に与える初期値を探索するには以下の手順に従う。なお、各個体は xy 平面上で等間隔に区切られたメッシュ上に分布している。

(1) 初期個体の生成

xy 平面上の座標値を遺伝子としてもつ個体を生成する。すなわち、個体の表現情報を座標値としている。

(2) 適応度の決定

各個体が生き残れる(子孫を残せる)可能性を表す情報であり、正の数値である。適応度が高い評価を受けるほど生存確率は高くなる。適応度は、式(1)の関数値のノルムの逆数により決定した。

(3) 選択(親となる個体の決定)

適応度が高い評価を受けた 2 つの個体を親として選択する。各個体の適応度に比例した確率で子孫を残せるようにした場合、個体の選択確率 P_{select_i} は

$$P_{select_i} = \frac{(1.0 - f_i / \Sigma f_i)}{\Sigma (1.0 - f_i / \Sigma f_i)}$$

となる。

(4) 交配(交叉・突然変異)

2つの親を交叉させ遺伝子の組み替えを行ない、新しい個体（子孫）を生成する。さらに、いくつかの子孫に対し遺伝子を変化させる突然変異を加える。

(5) 個体の取り除き（間引き）

(4)により生成された子孫に対し、 xy 平面上での座標値から各メッシュ上に存在する個体数を計算し、しきい値より評価され超えている場合子孫を取り除く。その後、適応度を計算する。

(2)から(5)を個体数分繰り返す、1回の繰り返すを1世代とした。なお、収束判定は個体の関数値による評価で行なう。

4. 改善点

遺伝的アルゴリズムの重要な概念の一つに突然変異がある。今回は、この突然変異に注目し突然変異を起こす制御を新たに追加した。具体的には、突然変異率 P_c を

$$P_c \leftarrow P_c \times \alpha \quad (\alpha: \text{パラメータ})$$

とした。なお、今回は α を 0.90 とした。

従来は、突然変異を一定に起こしており、新たに生成された個体が親の近傍に位置することが多かった。このため、収束に時間がかかる傾向にあると考えられた。そこで、突然変異を変動させながら起こせるようにした。

5. 実行例

連立代数方程式

$$\begin{cases} f(x, y) = -x^6 + 23x^4y^2 + 3x^2y^4 - 16x^2y^2 \\ \quad - 6y^6 + 0.2 = 0 \\ g(x, y) = x^4 + 2x^2y^2 + 6x^2y + y^4 - 2y^3 = 0 \end{cases}$$

について、遺伝的アルゴリズムによりニュートン法に与える初期値を探索した。ただし、 $x, y \in R$ とする。以下に、ニュートン法により近似解を計算した結果とともに示す。表1の上段は遺伝的アルゴリズムによって発見したニュートン法に与える初期値、下段はニュートン法による収束値である。また、上段の x, y のそれぞれの値は、あるメッシュ内における1点である。表2の上段は改善前の結果であり、下段は改善後の結果である。

これらの結果により、個体は2つの方程式の交点の近くに収束していることがわかる。また、突然変異を可変にし導入することにより、個体数を減少させても収束点数が増加した。さらに、収束までの時間が従来に比べ確実に短縮できている。

以上の結果より、遺伝的アルゴリズムを用いてニュートン法に与える初期値をより多く効率的に求めるには、適度に突然変異を可変に加える必要があると考えられる。

表1 収束値と関数値 (個体数 100)

| x の値 | y の値 | $ f(x, y) $ | $ g(x, y) $ |
|-----------|-----------|-------------|-------------|
| 0.218876 | 0.275696 | $1.4e-1$ | $5.2e-2$ |
| 0.215980 | 0.461483 | * | * |
| -0.217940 | 0.401192 | $6.4e-2$ | $2.8e-2$ |
| -0.215980 | 0.461483 | * | * |
| 0.782412 | -0.125112 | $4.7e-2$ | $6.1e-2$ |
| 0.754117 | -0.098630 | * | * |
| -0.760028 | -0.104202 | $9.5e-3$ | $1.2e-2$ |
| -0.754178 | -0.098630 | * | * |
| 1.333591 | -0.342497 | $1.6e-1$ | $1.9e-2$ |
| 1.338832 | -0.348459 | * | * |
| -1.328585 | -0.343709 | $1.0e-1$ | $1.2e-2$ |
| -1.338832 | -0.348459 | * | * |
| 0.241400 | -0.435299 | $3.3e-3$ | $7.4e-2$ |
| 0.279348 | -0.402971 | * | * |
| -0.232888 | -0.278673 | $2.0e-1$ | $3.0e-2$ |
| -0.279348 | -0.402971 | * | * |
| 0.807967 | -0.890917 | $2.3e+0$ | $1.7e-2$ |
| 0.926295 | 0.960786 | * | * |
| -0.809125 | -0.876182 | $2.1e+0$ | $7.3e-2$ |
| -0.926295 | -0.960786 | * | * |

*: すべて 10^{-17} 以下の値であった。

表2 突然変異の可変化による結果 (個体数 100)

| 回数 | 世代数 | 時間短縮率 | 収束点数 |
|----|------|-------|------|
| 1 | 993 | 1.00 | 5 |
| | 629 | 0.54 | 10 |
| 2 | 315 | 1.00 | 5 |
| | 164 | 0.44 | 10 |
| 3 | 548 | 1.00 | 6 |
| | 290 | 0.41 | 10 |
| 4 | 1000 | 1.00 | 6 |
| | 182 | 0.16 | 9 |

参考文献

- 1) 鈴木 秀男, 飯嶋 慎一: 連立代数方程式の数値解法における初期値探索に関する一考察, 第55回全国大会講演論文集(1), pp.74-75(1997)
- 2) 山本 哲朗: 数値解析入門, サイエンスライブラリ現代数学への入門=14, サイエンス社
- 3) 伊庭 斉志: 遺伝的アルゴリズムの基礎, オーム社
- 4) 北野 宏明: 遺伝的アルゴリズム, 産業図書