

自由形状処理における代数方程式の解決法

伊藤 英明
(株)SRA

自由曲線を含む形状の処理の中で干渉問題などはその非線形な関係をニュートン・ラフソン法に基づく収束計算により実数上で解くことが多いが適当な初期値を与えることに労力を要し、また曲線の特異点で計算が行き止まるなど必ずしも万全なものではない。

本稿ではそのような非線形な問題が代数方程式に帰着できる場合にはデュラン・ケルナー法 (Durand-Kerner's method) を用いてそのすべての複素解を確実に導出できることを前提とし、それら複素解の実部/虚部の関係を明らかにしたうえで実数解の選択に対して根拠のはっきりした方法を示す。これにより初期値の設定/特異点での対処等について問題別の考慮を必要とせず、許容誤差をも考慮できるポータブルな解決法が得られる。

A portable solution for an algebraic equation of free-form shape

Hideaki Itoh

Software Research Associates, Inc.,
1-1-1, Hirakawa-cho, Chiyada-ku, Tokyo, 102, Japan

In geometric operation of free-form shape, non-linear problems, such as interference, are usually solved by the iteration, based on Newton-Raphson method. However, it is generally difficult to find appropriate initial values, and the presence of irregularity leads the iteration process to the dead-end.

If the non-linear problem is expressed by an algebraic equation, Durand-Kerner's method is applicable to get all the complex roots. This paper describes the relation between real and imaginary parts of these roots, and the reasonable condition for selecting real roots with tolerance out of them.

By applying the obtained knowledge, a portable solution is realized for a class of non-linear free-form shape geometry problems, that eliminates case-by-case consideration about the initial value setting and irregularity handling.

1. はじめに

一般の工業製品と同様に CAD/CAM アプリケーションにも製品/機能の多様化と設計/製造時間の短縮化が求められておりそのために各処理分野に対して安定性及びモジュラリティの高い汎用的なアルゴリズムを準備することが必要になる。このようなものの中で一般的なものとして非線系方程式に対するニュートン・ラフソン法が挙げられるが、自由形状の処理においては適当な初期値の設定が難しい等いくつかの不都合があり必ずしも十分なものとはいえない。非線系方程式に対しては他に対象が代数方程式である場合に限られるがデュラン・ケルナー法と呼ばれる複素平面上ですべての解を同時に求めるアルゴリズムが知られているが、許容誤差を考慮した上で実数解を得たい場合にその明確な判断基準が示されていないことが問題だった。そこで本稿では代数方程式の複素解における実部と虚部の関係を明らかにし自由曲線の処理へのデュラン・ケルナー法の適用が誤差処理を含む形で統一的に行なえる事を述べる。まず次節でニュートン・ラフソン法とデュラン・ケルナー法の両者の特徴について述べる。そして第3節で得られる複素解の実部/虚部の関係を明らかにしそこから多項式の正確な零点となる実数解だけでなく許容誤差も考慮に入れた解が得られることを示す。最後に処理の具体例を紹介する。

2. ニュートン・ラフソン法とデュラン・ケルナー法

ニュートン・ラフソン法は解の周辺で導関数が連続かつ単調でありその範囲内で適当な初期値が得られるような場合には有効なアルゴリズムであるが自由形状の処理ではそのような初期値の設定が難しい場合が多くさらに複数個の解を必要とする時に異なる初期値が異なる解に収束する保証がないのでプログラムの安定性が確保しにくい。

非線系方程式の解法としてはほかに対象が代数方程式の場合に限られるがデュラン・ケルナー法が知られている。^{[1],[2]} これは非線系連立方程式を解くニュートン・ラフソン法を発展させて複素平面上ですべての解を一度に求めるものであり「アバースの初期値」といわれる初期値設定法を前処理として持っているために問題別の初期値設定処理が要らなくなる（対象が代数方程式で複素平面上で解くならばこの初期値はニュートン・ラフソンにおいても有効である）。よって上記の「初期値の設定」及び「解の個数」の問題は解決された複素平面上での計算であるために実数上では特異点であるところも微分可能になりプログラムの安定性及びモジュラリティが確保できる。

実用的には計算量の問題が重要になるが理論的には表2-A, 実際の計算時間では2-Bにあるように通常のニュートン・ラフソン法で「アバースの初期値」から出発してすべての複素解を求めようとする場合（実際には異なる初期値から同一の値に収束するものがあり、すべてが求まる事はまれである）よりすこし少ない程度である。

（ニュートン・ラフソンは2次収束であるがデュラン・ケルナーは3次収束になっているので収束までの反復回数はデュラン・ケルナー法の方が少ない。また、アバースの初期値における計算量は同次の条件の良い代数方程式に対して実数上でニュートン・ラフソンによって解を1個求める程度）

演算種類	Newton-Raphson	Durand-Kerner
加減	$(3*n^2+n)*J$	$(6*n^2+2*n)*J$
乗除	$(4*n^2+n)*J$	$(5*n^2+4*n)*J+n+1$
絶対値	$(4*n^2+n)*J$	$(2*n^2+2*n)*J+2*n+2$
最大値(max)	n^2*J	n^2*J
比較(if)	$n*J$	$n*J+n+1$

表2-A.

ニュートン・ラフソン (n 回繰り返し) とデュラン・ケルナーの計算量
(n - 代数方程式の次数, J - 収束までの反復回数)

次数	収束までの反復回数		所要時間 (秒)	
	Newton-Raphson	Durand-Kerner	Newton-Raphson	Durand-Kerner
3	7.1111	5.3333	0.0233333	0.016666
4	9.25	7.3333	0.0433333	0.033333
5	13.8	9	0.0966667	0.086666
6	16.3889	10.6667	0.146667	0.133333
7	12.2857	8.6666	0.166667	0.163333
8	18.0833	11.3333	0.376667	0.243333
9	23.7778	14.6667	0.536667	0.35
10	22.5333	13.3333	0.62	0.45
11	28.9091	16.6667	0.936667	0.693333
12	30.9167	18	1.21	0.966667
13	31.2307	19.6667	1.49667	1.13
14	23.2381	15	1.37	0.956667
15	31.4445	18	2.15333	1.44667

表2-B.

ニュートン・ラフソン (n 回繰り返し) とデュラン・ケルナーの収束までの反復回数および所要時間
(各次について係数をランダムに設定した数個の方程式の平均値. 所要時間は SONY/NEWS-820 による)

また計算の丸め誤差については多項式の値を計算する方法が同じであれば差はない。

3. 許容誤差の評価

形状処理では対応する n 次代数方程式 $F(z) = 0$ (以下の記述で z および $x+iy$ は複素数 [i は虚数単位], x および y は実数とする) の複素解 $Z_r = X_r + iY_r$ を n 個求めたあとに虚部 Y_r を持たない解を選択しなければならないが許容誤差を持つ処理では

$$F(X_r) = 0$$

を満たす実数解 $Z_r = X_r + i0$ だけでなく, $F(x)$ に対応する許容誤差 δ_0 に対して

$$(|F(X)| \leq \delta_0) \text{ and } (F^{(1)}(X) = 0) \text{ and } (F(X) * F^{(2)}(X) > 0) \quad (3-1)$$

を満たす X も得ることができなければならない (図3-A)。そして代数方程式の複素解の虚部 Y_r が十分小さな時にはその実部 X_r が (3-1) を満たすはずであり, 本節ではこれを考察する。

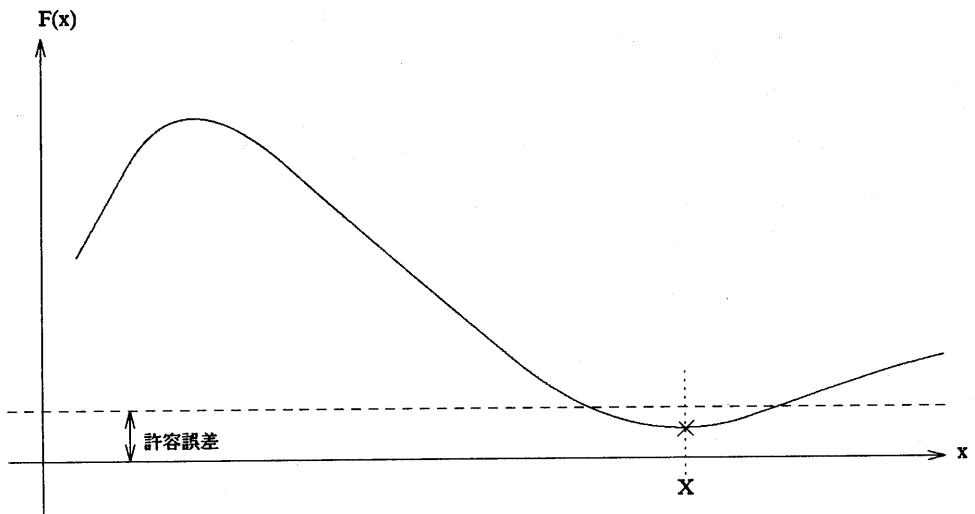


図3-A

いま自由曲線はパラメータの範囲が $0 \sim 1$ になるように正規化されており, ある処理に対応する代数方程式

$$F(z) = \sum_{j=0}^n A_j z^{n-j} = 0 \quad (A_j \text{ は実数})$$

の複素解を $Z_r = X_r + iY_r$ とする。

つまり,

$$F(X_r + iY_r) = 0 + i0 \quad (3-2)$$

ここで $F(z) = F(x + iy)$ を x を中心としてテーラー展開すると次の式が出る。

$$F(x + iy) = F_{\text{Re}}(x, y) + iF_{\text{Im}}(x, y)$$

$$F_{\text{Re}}(x, y) = \sum_{k=0}^P ((-1)^k * y^{2k} * \frac{F^{(2k)}(x)}{(2k)!}) \quad (3-3)$$

$$F_{\text{Im}}(x, y) = \sum_{k=1}^q ((-1)^{k+1} * y^{2k-1} * \frac{F^{(2k-1)}(x)}{(2k-1)!}) \quad (3-4)$$

(p は n を 2 で割った商, q は p に n を 2 で割った余りを足したもの。
 $F^{(l)}$ は F の l 階導関数)

そして変数 x, y に X_r, Y_r を代入すると (3-3), (3-4) は (3-2) より

$$\sum_{k=0}^p ((-1)^k * Y_r^{2k} * \frac{F^{(2k)}(X_r)}{(2k)!}) = 0 \quad (3-5)$$

$$\sum_{k=1}^q ((-1)^{k+1} * Y_r^{2k-1} * \frac{F^{(2k-1)}(X_r)}{(2k-1)!}) = 0 \quad (3-6)$$

さらにそれぞれ $F(X_r), F^{(1)}(X_r)$ に注目して

$$F(X_r) = (\sum_{k=1}^p ((-1)^{k+1} * Y_r^{2k} * \frac{F^{(2k)}(X_r)}{(2k)!})) \quad (3-7)$$

$$F^{(1)}(X_r) = (\sum_{k=2}^q ((-1)^k * Y_r^{2k-1} * \frac{F^{(2k-1)}(X_r)}{(2k-1)!})) * \frac{1}{Y_r} \quad (3-8)$$

が得られる。ここで F の各導関数は有界^[4]だから

Y_r が十分 0 に近ければ, $|F(X_r)|, |F^{(1)}(X_r)|$ も 0 に近い
 (しかし $Y_r = 0$ では一般に $|F^{(1)}(X_r)| = 0$ は成り立たない)。

またこのとき $F^{(2)}(X_r) = 0$ でなければ (3-7) において $k \geq 2$ の項の和の絶対値が $k = 1$ の項の絶対値より小さいことがほとんど考えられるので、

$$F(X_r) \text{ と } F^{(2)}(X_r) \text{ は同符号になり } F(X_r) * F^{(2)}(X_r) > 0$$

以上より複素解の虚部 Y_r ($\neq 0$) の絶対値が小さくなるにつれて実部 X_r が (3-1) を満たす可能性が高くなること
 がわかる。($F^{(1)}(X)$ については $= 0$ ではなく ≈ 0 であるから、厳密に言えば (3-1) を満たす X を求める収束計
 算のための非常に条件の良い初期値である)

ところが (3-7), (3-8) それぞれに関係する導関数の値によって比較的大きな Y_r を持つ X_r も (3-1) を満たすこと
 はあり、よってこれのみ限り Y_r のみから $|F(X_r)|$ を判断することは適当ではなく、実用に際しては実部 X_r から
 $F(X_r), F^{(l)}(X_r)$ [$l=1, 2$] を直接計算して条件に当てはめてみる他に正確な判定はできない(このための計算
 量はデュラン・ケルナー法の収束回数が増えた程度である)。

したがって前節と本節を総合すると次の結論となる。

代数方程式に帰着できるような自由形状処理ではデュラン・ケルナー法を用いてすべての複素解を求めた後に
 虚部の大きさではなく実部をあてはめた方程式およびその導関数の値を検査して最終解とするアルゴリズムが
 安定/正確で汎用的である

(ただし (3-1) を満たすすべての解が得られる保証はない[残る問題 1])

4. 処理の実例

この節では自由曲線処理への実例を示す。

曲線を多項式で表現すると曲線自身の導関数情報(接線ベクトル, 曲率等)の特異な点を調べる処理およびノンパラメトリックに $f(x, y, z) = 0$ で表される形状との関係(交点, 距離等)を得る処理に対応する代数方程式を作る事ができる。

ここでは直線との交点を求める処理を考える。

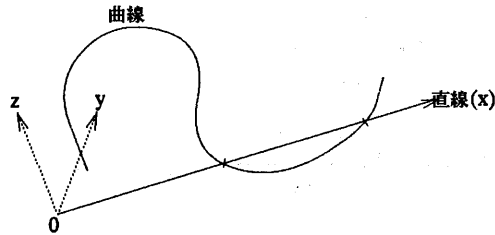


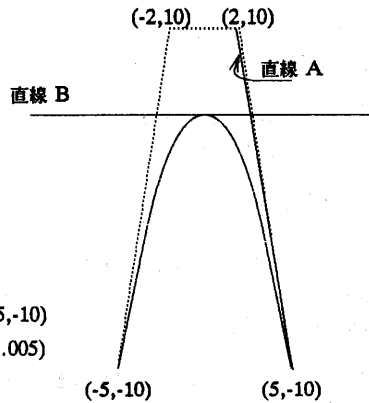
図4-A

交点は図4-Aのように曲線 $P(t) = [x(t) \ y(t) \ z(t)]$ を直線を x -軸とする直交座標系に変換して(それを P^* とする) その y 成分及び z 成分が共に 0 となる点だから

$$\{y^*\}^2 + \{z^*\}^2 = 0$$

を解けばよく, n 次の曲線に対し最高で $2n$ 次の式になる。

この処理で前節の記述を確かめる。



直線 A = (1.995, 10), (5.005, -10)
直線 B = (-10, 5.005), (10, 5.005)

図4-B (3次の Bezier 曲線と直線 A, B)

図4-Bの直線 A, Bは実際には Bezier との交点を持たないが最短距離がある程度小さい例である。

まず直線 A と Bezier との交点であるが, その代数方程式は次数が 6 次で高次から順に以下の係数を持つ。

$$3.91141, 23.5858, -34.9671, -173.492, 435.869, -352.79, 97.883$$

これに対する複素解は,

(0.998787 0.0203545), (0.998787 0.0203553), (-5.01257 -9.25098e-13),
 (-5.01257 8.42098e-12), (0.998787 -0.0203545), (0.998787 -0.0203552)

となる。この中で実部が Bezier のパラメータ区間 (0-1) に入っているのは (0.998787 ±0.020355) で、この解についての $F, F^{(l)}$ [$l=1,2$] および (3-7), (3-8) の右辺の各項の値が表 4-C である。

$$\begin{aligned} F &= 2.426383919e-05 \\ F^{(1)} &= 8.079802754e-06 \\ F^{(2)} &= 0.234251043 \end{aligned}$$

		(3-7)	(3-8)
右辺	k=1	4.85293422536974e-05	1.61529237919092e-05
	k=2	-2.42657812692218e-05	-8.0731207667013e-06
	k=3	2.78221996536436e-10	

表 4-C

これに対して直線 B との交点はその代数方程式の高次 2 つの項の係数が 0 になるので次数が 4 次となり高次から順に以下の係数を持つ。

$$3600, -7200, 5400.6, -1800.6, 225.15$$

そして複素解は、

$$(0.5 0.00912871), (0.5 0.00912876), (0.5 -0.00912871), (0.5 -0.00912874)$$

であり、この解についての $F, F^{(l)}$ [$l=1,2$] および (3-7), (3-8) の右辺の各項の値は表 4-D となる。

$$\begin{aligned} F &= 2.500000024e-05 \\ F^{(1)} &= 3.593575224e-07 \\ F^{(2)} &= 1.200000004 \end{aligned}$$

		(3-7)	(3-8)
右辺	k=1	5.00003873379141e-05	3.59359463399466e-07
	k=2	-2.50003871779068e-05	

表 4-D

これを直線 A の場合と比べると F はほぼ同じ値、 $|F^{(1)}| = 0$ であるが、 $F^{(2)}$ 以下の大きさの違いによって複素解の虚部は 2 分の 1 以下の大きさになっている。

また、理論的な確認はできていないが Y_p の絶対値が小さくなるにつれて $F, F^{(1)}$ とそれぞれに対応する右辺の第 2 項(k=2)は異符号でほぼ等しい絶対値を持ち、その大きさは右辺の第 1 項(k=1)の絶対値の 2 分の 1 程度になるようである [残る問題 2]。

もう 1 例、解が特異点にある場合を挙げる。

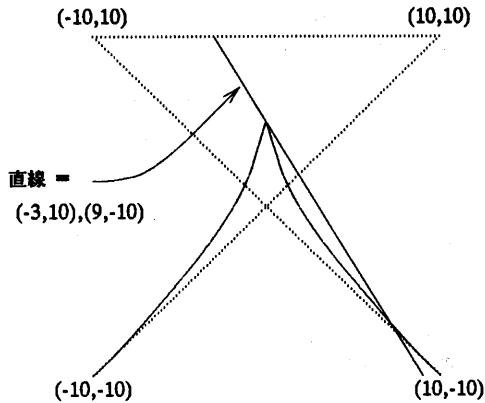


図4-E (特異点を持つ3次の Bezier 曲線と直線)

図4-Eは特異点を持った曲線と直線がちょうど特異点のところ(自由曲線のパラメータ値は 0.5)で交わっており接線ベクトルを使っでの収束計算では求めにくい例であるが、これを求める代数方程式は次数 6 で以下の係数を持つ。

$$4705.88, -18352.9, 29188.2, -24258.8, 11135.3, -2682.35, 265.441$$

そして複素解は

$$(0.95 \ 3.24614e-09), (0.500114 \ 5.36847e-05), (0.499938 \ 0.000111967), \\ (0.499891 \ -8.96768e-05), (0.500063 \ -0.000111499), (0.95 \ -1.34377e-10)$$

となり解が特異点にあるときにも特別な考慮を必要とせず処理できることが判る。(ただ、この場合は重根の実数解で複素平面においてもその周辺での1次微分が0に非常に近くなっているため精度が若干おちている)

この他、特異点・変曲点・接線ベクトル極値・曲率極値・ノンパラメトリック表現可能な曲線/曲面との交点の導出がそれぞれに対応する代数方程式の解を求めることによって行なえる。

5. おわりに

以上、ニュートン・ラフソン法とデュラン・ケルナー法を比較して形状処理に対する後者の優位性を見たあとに代数方程式の複素解の中から実数解を選択する処理において正確な零点以外に許容誤差内にある解も得られることを示し、自由曲線処理の実例によって確認した。ここに述べたことは自由曲線に限らず初等幾何曲線の処理さらに形状処理以外にも適用できることはもちろんである。

今後の課題としては、まず[残る問題1, 2]の理論的な証明があり、それによりもっと効率的な処理が行なえるようになることは十分考えられる。

さらには困難であるかもしれないが代数方程式以外の非線系方程式への応用および多変数方程式(自由曲線 vs 自由曲面, 自由曲面処理)への拡張が考えられる。

参考文献

- [1] 伊理正夫・藤野和建: "数値計算の常識", 共立出版, 1985
- [2] 森 正武: "FORTRAN77 数値計算プログラミング <岩波コンピュータサイエンス>", 岩波書店, 1986
- [3] 山口富士夫: "形状処理工学 [II]", 日刊工業新聞社, 昭和57
- [4] E. Kreyzig 著/丹生慶四郎・阿部寛治訳: "技術者のための高等数学4 複素関数論", 培風館, 1988