

Interval Krawczyk Method とその力学系への応用

荒井 迅¹

北海道大学創成研究機構 / JST さきがけ

Abstract. 力学系の周期軌道の存在を計算機を援用して証明する手法として、区間 Krawczyk 法 (interval Krawczyk method) というニュートン法と Brouwer の不動点定理を区間演算を用いて組み合わせた手法が近年注目を集めている。本稿では、この手法を用いて証明された力学系の結果を幾つか概説し、さらに区間 Krawczyk 法の基礎をなす解の存在と一意性定理の証明を与える。

1. はじめに

「関数 $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ に対し $x \in \mathbb{R}^n$ で $F(x) = 0$ となるものを見つけよ」

という問題を考える。すなわち方程式 $F(x) = 0$ を解けという事である。方程式が代数的に解けない場合には、ニュートン法を用いるのが古典的かつ最も有用なアプローチであろう。今回紹介する区間 Krawczyk 法は、ニュートン法と Brouwer の不動点定理を区間演算用いて組合せたものと言える。

区間 X と $x_0 \in X$ に対し、区間 Krawczyk 作用素は

$$K(x_0, X, F) := x_0 - CF(x_0) + (\text{Id} - C[dF(X)]) \cdot (X - x_0)$$

で定義される。ここで C はある可逆な行列である。一見するとニュートン法の作用素とはだいぶ異なる形をした作用素だが、後で述べるように実はニュートン法の自然な拡張になっており、うまく用いると $F(x) = 0$ の解の存在と一意性が一気に検証できる優れ物なのである。

作用素の構成や性質は後回しにして、この節では区間 Krawczyk 法によりどんな事が証明できるのか見てみよう。ここで取り上げるのは、力学系の周期軌道の存在証明に適用した結果である。周期軌道の存在をある適当な関数 F の零点の存在に言い換えた上で、零点の存在を区間 Krawczyk 法で証明する、というのが以下に紹介する結果の基本的な議論である。

¹arai@cris.hokudai.ac.jp

まずは平面上の N 体問題を考えよう．質点の質量を全て等しいとすると，考える微分方程式は

$$\ddot{q}_i = \sum_{j \neq i} \frac{q_j - q_i}{\|q_j - q_i\|^3}$$

となる．ここで $q_i \in \mathbb{R}^2, i = 1, \dots, N$ である．

定義 1. N 体問題の周期 T の simple choreography とは， N 体問題の解であって，全ての質点が衝突せずにある 1 つの閉曲線上を運動し，時間 T/N ごとに質点の位置が巡回的に置換されるもののことである．

choreography とはダンスのステップや動きのことであり，質点たちが一つの軌道の上をダンスするように動くことからこう呼ばれている．近年まで，simple choreography として知られているのは 18 世紀に Lagrange が発見した正 N 角形の頂点上に配置された質点が一定の角速度で回転するような単純なものしかなかった．ところが 20 世紀末に Chenciner と Montgomery により 8 の字状の閉曲線の上の 3 体 choreography の存在が証明され，これを契機として爆発的に研究が進んだ．

Chenciner と Montgomery による 8 の字解の証明は変分法を用いた解析的なものであったが，Kapela と Zgliczyński は 8 の字解を含む複数の choreography の存在について，区間 Krawczyk 法を用いた計算機援用証明を与えることに成功した．

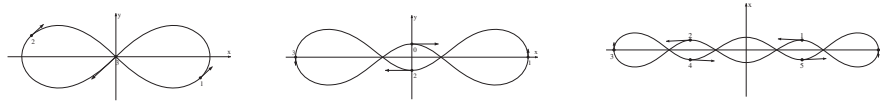


Figure 1. 3 体 8 の字解, 4 体 Gerver 軌道, 6 体 super-eight [2]

定理 2 (Kapela-Zgliczyński [2]). 平面 N 体問題には次の simple choreography が存在する (Figure 1) .

- 3 体 8 の字 choreography.
- 4 体 “super-eight” choreography (別名 Gerver 軌道).
- 6 体 “super-eight” choreography.

さらに Kapela と Simó は以下のようなより複雑な形状の choreography の存在を示した．

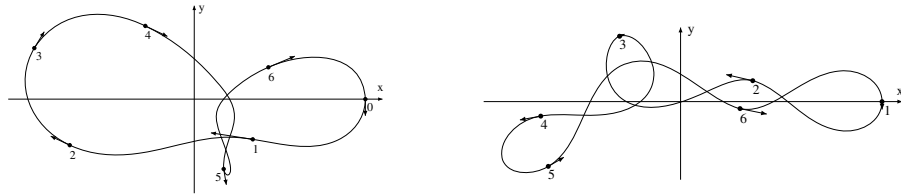


Figure 2. 7体および6体の choreography [1]

定理 3. 平面 7体および 6体問題には Figure 2に示される非対称な *simple choreography* が存在する.

Simó は上記以外にも様々な choreography を数値的に発見している. それらの choreography のアニメーションは

<http://www.maia.ub.es/dsg/nbody.html>

で見ることができる.

上に挙げた結果は連続力学系のものであったが, 離散力学系においても次のような結果が得られている. 1次元の2次多項式写像

$$Q_a : [0, 1] \rightarrow [0, 1], \quad Q_a(x) = ax(1 - x)$$

の力学系を考えよう. よく知られているように, 単純な周期的な振舞の力学系が周期倍分岐を経てカオスへ成長する様子がパラメータ a を大きくしていくと観察される (Figure 3).

定義 4. パラメータ a において Q_a が吸引力的な周期点を持つとき, a は**正則** (regular) なパラメータであるという. また, パラメータ a において Q_a がルベーク測度に絶対連続な不変測度を持つとき, a は**確率的** (stochastic) なパラメータであるという.

簡単に言うと, 正則なパラメータにおいては力学系は漸近的には単純な周期的な振舞いをし, 確率的なパラメータにおいては複雑なカオス的な振舞いをする. 考えるパラメータを $a \in [0, 4]$ とし, そのうち正則なパラメータと確率的なパラメータの集合をそれぞれ R, S と書くことにしよう.

定理 5 (Lyubich). ルベーク測度に関してほとんど全てのパラメータは正則であるか, 確率的であるかのどちらかである. すなわち,

$$|R| + |S| = 4.$$

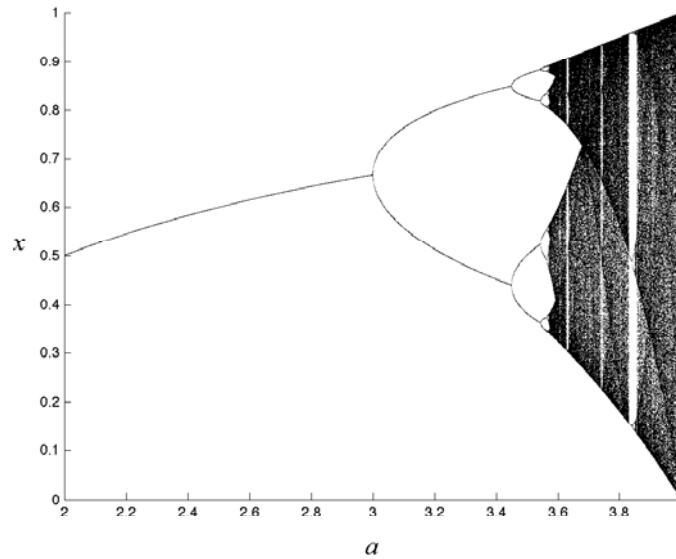


Figure 3. Q_a の分岐図: 横軸にパラメータ a をとり, 縦軸には充分時間が経った後の軌道をプロットしたもの.

この定理により, 力学系 Q_a の振舞いはのとしては正則な挙動と確率的な挙動の 2 種類を押さえればよいことがわかるのだが, では

「実際のところ, S や R はどのくらい大きな集合なのか？」

という疑問が生じる. ここでいう「大きさ」とは, ルベグ測度のことである. すなわち, ランダムにパラメータを選んだときに, 系が周期的になる確率とカオス的になる確率の比はどれくらいだろうか, という問題である.

今までに知られている数学的に厳密な結果としては

- $|S| > 0$ (Jacobson 1981, Benedicks-Carleson 1985, etc.)
- $|S| > 10^{-5000}$ (Luzzatto-Takahashi 2006)

などがある.

これらは, カオス的なパラメータは確かに正の確率で存在すること (Jacobson, Benedicks-Carleson), さらにその確率が少なくとも 10^{-5000} より大きいこと (Luzzatto-Takahashi) を意味する. Figure 3 を見ると Q_a がカオス的になるパラメータは沢山ありそうに思えるが, 数値計算で複雑な軌道に見えても, それは実は非常に周期の高い周期点かも知れない. 例えば Q_a が周期 1000 兆の吸引力的な周期点を持つとすると (実際に Q_a がそのような周期点を持つパラメータは存在する), 倍精度程度の計算では Q_a は完全にカオス的に見えてしまう. 数値計算の結果からは S の大きさに関して

は何も結論出来ないのである。そのため、上に挙げた数学的に厳密な結果が非常に重要となる。

とはいえ、 10^{-5000} はいかにも小さい。Simó の数値計算によれば、最初の周期倍分岐カスケードが終了する点から $a = 4$ までのパラメータのうち、およそ 10.4% が正則なパラメータだと思われる。すなわち $a^* \approx 3.569945672$ に対して $|R \cap [a^*, 4]| \approx 0.0455857$ である。ただし、この主張は数値計算によるものであり、数学的に証明されたものではない。 $|R| + |S| = 4$ なので Simó の計算は 90% 近くのパラメータが確率的であると予想しているわけだが、その主張が数学的に証明できているのが Luzzatto-Takahashi による 10^{-5000} しかない、という状況なのである。

そこで今回紹介する Tucker と Wilczak の結果となるのだが、これは Jacobson や Luzzatto-Takahashi の結果とは逆に、正則なパラメータの大きさを下から評価するものである。

定理 6 (Tucker-Wilczak [3]).

$$|R \cap [2, 4]| \geq 1.61394824439594656781.$$

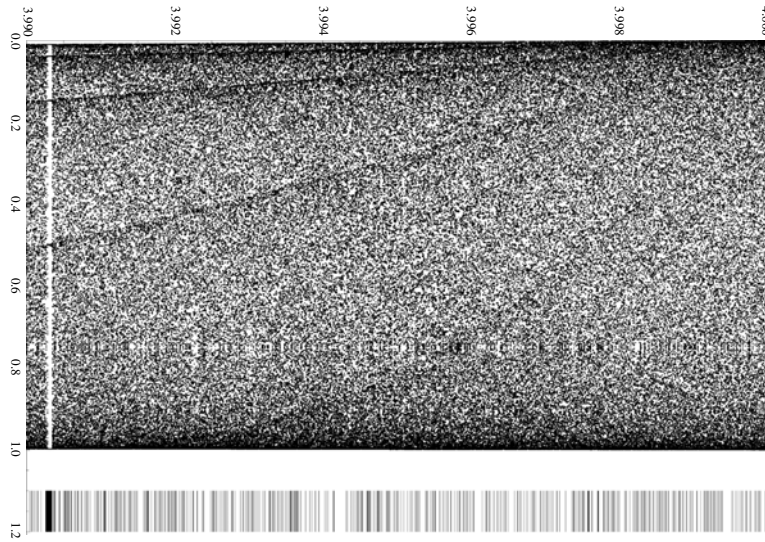


Figure 4. Tucker-Wilczak [3] より。Figure 3 と同様に横軸はパラメータ a 、縦軸は軌道である。下部のバーコード状の黒い帯は、彼らが発見した R の部分集合を表示している。一見カオス的に見える領域にも正則なパラメータが多く存在していることがわかる。

この定理は精度保証付きであり、数学的に厳密な結果である。おおまかに言うと、区間 $[a^*, 4]$ のうち 10.2% 以上のパラメータが正則であると定

理は主張しており、先に述べた Simó の観測に非常に近い値となっている。ただしこれは $|R|$ の下からの評価なので、 $|S|$ の上からの評価は得られるものの、 $|S|$ の下からの評価に関しては何も主張していないことに注意したい。下からの厳密な評価としては依然 $|S| > 10^{-5000}$ が最良である。

2. 力学系と関数の零点

この節では、力学系の周期軌道を求める問題が、いかにして関数の零点を求める問題に翻訳されるかを見る。

まず、平面 N 体問題の周期 T の choreography を探す問題 [1, 2] を考えよう。我々が見つけたいのは軌道の初期値

$$x = (q_1, p_1, q_2, p_2, \dots, q_N, p_N), \quad q_i, p_i \in \mathbb{R}^2$$

である。軌道が choreography であることから、 N 個の質点はその配置を時間 T/N ごとに順番に入れ替わる。よって質点たちに巡回置換をほどこすと、 x を力学系により時間 T/N だけ発展させた $\psi(x, T/N)$ と等しくなっているはずである。

このことから、 σ を質点の（逆向きの）巡回置換

$$\sigma(q_1, p_1, q_2, p_2, \dots, q_N, p_N) = (q_N, p_N, q_1, p_1, \dots, q_{N-1}, p_{N-1})$$

とし、

$$G(x) := \sigma \cdot \psi(x, T/N).$$

とおくと、 x が N 体問題の周期 T の choreography の初期値であることと、 x が関数

$$F(x) := G(x) - x$$

の零点であることが同値であることがわかる。

このように問題を $F(x) = 0$ の零点の存在に翻訳し、区間 Krawczyk 法を用いて零点の存在を証明する、というのが論文 [1, 2] の基本的な流れであるが、実際にこれを実行する上で、相空間の次元が大きな問題となる。零点の存在という扱いやすい問題に翻訳はできたものの、 $F(x)$ を計算するためには微分方程式を時間 T/N だけ精度保証付きで積分せねばならない。次元が高いと wrapping effect などにより誤差が拡大し、区間 Krawczyk 法を使うための仮定を示すことが難しくなるのである。そこで、[2] では choreography の対称性を用いて問題の次元を下げている。[1] ではそのような対称性のない choreography を扱っているため（第 1 積分を用いて次元を下げる工夫をしているが）、[2] よりも計算量はかなり大きなものになっている。

また、区間 Krawczyk 法を用いて解の存在を証明するためには、後で解説するようにあらかじめ $F(x) = 0$ の解の近似値を知っている必要があ

るのだが，論文 [1, 2] においては通常のニュートン法などを用いて数値的に求めた choreography を近似値として用いて証明に成功している．

では次に，

$$Q_a : [0, 1] \rightarrow [0, 1], \quad Q_a(x) = ax(1 - x),$$

の吸引力的な周期点を探す問題 [3] を考えよう．

写像 Q_a の n 回くり返し合成を $Q_a^{\circ n}$ と書く．たとえば，

$$Q_a^{\circ 2}(x) = Q_a(Q_a(x)) = Q_a(ax(1 - x)) = a(ax(1 - x))(1 - ax(1 - x))$$

である．点 x が n 周期点であるとは $Q_a^{\circ n}(x) = x$ となることなので， n 周期点を見つけることは関数

$$F(x) := Q_a^{\circ n}(x) - x$$

の零点を見つけることと同値である．論文 [3] においては，この $F(x) = 0$ の解の存在を区間 Krawczyk 法を用いて証明している．実際には，計算速度の問題からまず Brouwer の不動点定理での証明を試み，失敗したら backward shooting を試し，それでも駄目なら区間 Krawczyk 法を用いるアルゴリズムになっている．

先の choreography の場合と違い，相空間は 1 次元なので次元の高さに起因する困難はないのだが，今度は多項式の次数が問題となる．なぜなら，合成により $Q_a^{\circ n}$ は 2^n 次多項式となるので，高い周期の周期点を見つけるためには非常に高い次数の多項式を解かねばならないからである．論文 [3] では周期が最大で 28672 の周期軌道を計算しているが， $n = 28672$ のとき $F(x)$ は $2^{28672} \approx 1.355 \times 10^{8545}$ 次多項式になってしまう．区間演算を用いると，区間の積を取るたびに誤差が累積するので， 2^{28672} 次多項式などとても扱えない．

そこで，問題の次元を高くするかわりに，次数を下げることを考える．次数が 2^n の 1 次元方程式

$$F(x) = (Q_a)^{\circ p}(x) - x = 0$$

を解くかわりに，

$$G(x_1, \dots, x_p) := (x_2 - Q_a(x_1), \dots, x_p - Q_a(x_{p-1}), x_1 - Q_a(x_p))$$

とにおいて方程式

$$G(x_1, \dots, x_p) = 0$$

を解くのである．この方程式は次元が p になってしまったが，そのかわり次数は 2 になったので，区間演算の観点から見ると先の 2^n 方程式とくらべて格段に扱いやすくなっているのである．時間発展が写像で直接に与えられているので，次元が高くても微分方程式を積分する困難は起きないことに注意しよう．

3. 区間 Krawczyk 法

この節では、区間 Krawczyk 法の定式化と、その基礎をなす解の存在と一意性定理の証明を [4] に沿って与える。

$F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ を C^1 級の関数とし、方程式

$$F(x) = 0$$

を解く問題を考えよう。

まず普通のニュートン作用素を

$$N(x) = x - (dF(x))^{-1}F(x)$$

で定義する。もし $x^* \in \mathbb{R}^n$ が N の不動点であり（すなわち $N(x^*) = x^*$ ）かつ $dF(x^*)$ が可逆であれば、 x^* は元の方程式の解である。すなわち $F(x^*) = 0$ 。逆に、 $F(x^*) = 0$ かつ $dF(x^*)$ が可逆であれば、 x^* は力学系 $N : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ の不動点である。さらに、このとき x^* は力学系 N の超吸引的な不動点（微分の固有値が 0）となる。この事実こそがニュートン法の収束が高速であることの力学系的な理由である。

この事実から、 $x_{n+1} = N(x_n)$ を $N : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ の軌道とすると、 x_n は N の不動点に収束することが期待され (Figure 5)，この方法により N の不動点、すなわち $F(x) = 0$ の解を求める方法がニュートン法であった。

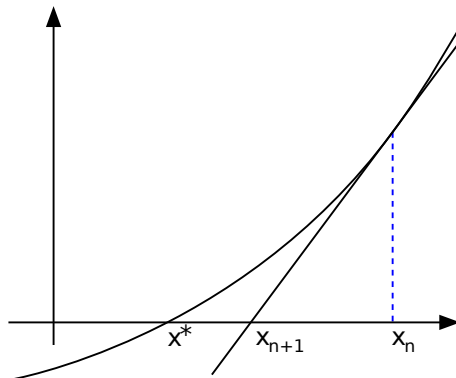


Figure 5. ニュートン法による軌道 $N(x_n) = x_{n+1}$

では、次にニュートン法と区間演算を組合せることを考えよう。 $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ を C^1 級の関数、 $X \subset \mathbb{R}^n$ を空でない閉区間の n 個の直積としよう。このとき、点 $x_0 \in X$ での区間ニュートン作用素を

$$N(x_0, X) := x_0 - [dF(X)]^{-1}F(x_0)$$

で定義する。ただし、ここで $[dF(X)]$ は $dF(x)$ を $x \in X$ に関して評価して得られる、区間を成分とする行列である。これは実数を成分とする行列の集合とすることができる。

$[dF(X)]$ が可逆である、すなわち $[dF(X)]$ のに属する全ての実数行列の行列式が 0 を含まないとしよう。このとき、次の性質が成立する。

- もし $x^* \in X$ が $F(x^*) = 0$ を満たすならば $x^* \in N(x_0, X)$.
- もし $N(x_0, X) \subset X$ ならば、 $x^* \in X$ であつて $F(x^*) = 0$ となるものがただ一つ存在する。

このように区間ニュートン作用素は解の存在と一意性を一気に証明できる強力なものだが、残念ながら区間演算で生じる wrapping effect などにより、仮定である $[dF(X)]$ の可逆性を証明するのは一般に難しい。解 x^* において $dF(x^*)$ が可逆であっても、区間行列の行列式を計算する段階で誤差がふくらんでしまうのである。

そこで、区間行列 $[dF(X)]$ を、それに十分近い単一の行列で置き換えて同じ議論が出来ないか考えよう。

そのために、まずは一旦普通のニュートン作用素に戻って、

$$N(x) = x - (dF(x))^{-1}F(x)$$

の $dF(x)^{-1}$ を、ある適当な可逆行列 C で置き換えてみる。実際に用いる際には、 C は解 x^* における $dF(x^*)^{-1}$ に十分近い行列を何らかの方法で構成しないとイケないのだが、いまの段階では C は可逆であれば何でもよい。

こうして得られた

$$N_m(x) = x - CF(x)$$

を修正ニュートン作用素と呼ぶ。まったく適当に C を選んだとしても

$$F(x^*) = 0 \quad \Rightarrow \quad N_m(x^*) = x^*$$

という性質はニュートン作用素と同様に成立していることに注意しよう。

命題 7. $X \subset \mathbb{R}^n$ を空でない閉区間の n 個の直積とする。もし

$$N_m(X) \subset \text{int } X$$

ならば、 $F(x^*) = 0$ を満たす $x^* \in X$ がただ一つ存在する。

Proof. 解の存在を示すには、Brouwer の不動点定理を用いればよい。一意性を示すには、作用素 N_m が X 上で縮小写像になっていることを示せばよい（後で区間 Krawczyk 法の設定で証明するのでここでは省略）。 $\square$

行列 C は適当に選んだものを一つ固定しておけばよいので、この修正ニュートン法の区間演算版をつくれば、区間ニュートン法のように $[dF(X)]$ の可逆性を示す困難もなく、上手くいくのではないかと期待される。ところが、残念ながら $N_m(X) \subset X$ という主張は区間演算を単純に適用するだけでは証明できないのである。修正ニュートン法の点 x を区間 X で置き換えてみると、

$$N_m(X) = X - CF(X)$$

を得るのだが、区間演算の性質から区間 $X - CF(X)$ の直径は区間 X の直径より大きくなってしまふので、 $N_m(X) \subset X$ は成立しないのである。

そこで次のようなトリックを用いる。まず基点 $x_0 \in X$ を適当に選ぶ。すると平均値の定理より

$$\begin{aligned} N_m(X) &\subset N_m(x_0) + [dN_m(X)] \cdot (X - x_0) \\ &= x_0 - CF(x_0) + (\text{Id} - C[dF(X)]) \cdot (X - x_0) \end{aligned} \quad (\clubsuit)$$

が成立する。この式を見ると、前半の $x_0 - CF(x_0)$ には区間は登場せず、後半では区間 $X - x_0$ に区間行列 $\text{Id} - C[dF(X)]$ が掛けられている。区間 $X - x_0$ は X の平行移動なので、その直径は X の直径と等しい。よって $C[dF(X)]$ が Id に充分近ければ、 $N_m(X)$ の直径は X の直径で押さえることが出来るのである。

このトリックを定式化したのが区間 Krawczyk 作用素である。

定義 8. C を可逆な $n \times n$ 行列とする。空でない閉区間の n 個の直積 $X \subset \mathbb{R}^n$ と $x_0 \in X$ に対し

$$K(x_0, X, F) := x_0 - CF(x_0) + (\text{Id} - C[dF(X)]) \cdot (X - x_0)$$

を区間 Krawczyk 作用素と呼ぶ。

定理 9. 区間 Krawczyk 作用素に対し以下が成立する。

- (1) もし $x^* \in X$ かつ $F(x^*) = 0$ ならば $x^* \in K(x_0, X, F)$.
- (2) もし $K(x_0, X, F) \subset \text{int } X$ ならば $F(x^*) = 0$ を満たす $x^* \in X$ がただ一つ存在する。

Proof of Theorem 9 (1). 同じ行列 C に対して定義される修正ニュートン作用素を N_m とすると、 $(\clubsuit)$ より $N_m(X) \subset K(x_0, X, F)$ が成立する。よって、

$$x^* = N_m(x^*) \in N_m(X) \subset K(x_0, X, F).$$

□

Proof of Theorem 9 (2). 解の存在を示すには,

$$N_m(X) \subset K(x_0, X, F) \subset \text{int } X$$

より, Brouwer の不動点定理を N_m に用いればよい. $\square$

一意性を示すために, 補題を準備する.

補題 10. 凸集合 $X, Y \subset \mathbb{R}^n$ が $X = -X, Y = -Y$ を満たすとする. このとき $v \in \mathbb{R}^n$ と線型写像 $A: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ に対し

$$v + AX \subset Y \quad \Rightarrow \quad AX \subset Y.$$

Proof. 仮定より $x \in X$ に対し

$$v + Ax \in Y$$

である. いま $X = -X$ より $-x \in X$ なので, $v + A(-x) = v - Ax \in Y$ も成立する. $Y = -Y$ を用いると

$$-(v - Ax) = -v + Ax \in Y$$

となるが, Y は凸なので

$$Ax = \frac{v + Ax}{2} + \frac{-v + Ax}{2} \in Y.$$

$\square$

補題 11. 凸集合 $X, Y \subset \mathbb{R}^n$ が $X = -X, Y = -Y$ を満たすとする. このとき $v, x, y \in \mathbb{R}^n$ と線型写像 $A: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ に対し

$$v + A(x + X) \subset y + Y \quad \Rightarrow \quad AX \subset Y.$$

Proof. 仮定より

$$(v + Ax - y) + AX \subset Y$$

なので, 主張は前の補題より従う. $\square$

Proof of Theorem 9 (2). 解の一意性を示そう.

任意に選んだ $A \in \text{Id} - C[dF(X)]$ と $v := x_0 - CF(x_0)$ に対し定理の仮定により

$$v + A(X - x_0) \subset K(x_0, X, F) \subset \text{int } X$$

が成立する. この関係をベクトル x_0 だけ平行移動することにより

$$(v - x_0) + A(X - x_0) \subset \text{int}(X - x_0) \quad (\spadesuit)$$

を得る.

集合 $X - x_0$ は区間の直積なので, その中心 x_c と $X_c := X - x_0 + x_c$ を用いて

$$X - x_0 = x_c + X_c$$

と書くことが出来る. このとき $X_c = -X_c$ であり X_c は凸集合であることに注意しよう. この表現を用いると式 (♠) は

$$(v - x_0) + A(x_c + X_c) \subset x_c + \text{int}(X_c)$$

となる. この式に補題を適用すると,

$$AX_c \subset \text{int } X_c$$

が得られる. 集合 $\text{Id} - C[dF(X)]$ はコンパクトなので, ある $\alpha < 1$ が存在して, 任意の $A \in \text{Id} - C[dF(X)]$ に対して

$$AX_c \subset \alpha X_c$$

が成立するようにできる. 集合 X_c は $\mathbb{R}^n$ の box ノルムに関する単位球なので, これはすなわち

$$|\text{Id} - C[dF(X)]| \leq \alpha < 1.$$

を意味する. このことから, 修正ニュートン作用素 $N_m(x) = x - CF(x)$ が X 上で縮小写像となることがわかり, 解の一意性が従う. $\square$

References

- [1] Tomasz Kapela and Carles Simó, Computer assisted proofs for non-symmetric planner choreographies and for stability of the Eight, *Non-linearity* **20** (2007).
- [2] Tomasz Kapela and Piotr Zgliczyński, The existence of simple choreographies for the N-body problem—a computer-assisted proof, *Non-linearity* **16** (2003).
- [3] Warwick Tucker and Daniel Wilczak, A rigorous lower bound for the stability regions of the quadratic map, *Pysica D* **238** (2009).
- [4] Piotr Zgliczyński, Interval Krawczyk and Newton method, course notes, <http://www.ii.uj.edu.pl/~zgliczyn/>