数値解析 17－1
（1986. 7. 4）

数値計算における基本手法"区間演算"について

山本 哲朗
愛媛大学理学部

電子計算機の発達により，いろいろな問題が解けるようになった．しかし，通常の浮動小数点演算によりえられる結果は常に誤差を含み，それが何処まで正しいかについての保証は何もない．区間演算は，このような伝統的数値計算の欠点をなくすために考えられた手法であって，計算の各ステップを区間として表現し，最終結果に対する厳密な品質保証を与えようとするものである。
Moore [4] および Kulisch-Miranker [3] に基づき，区間演算技法開発の現状を報告する．

WG NA 17-1

On Interval Arithmetic, a Fundamental Tool in Numerical Computations (in Japanese)

by Tetsuro YAMAMOTO

Department of Mathematics, Ehime University, Matsuyama 790, Japan

Recent developement of computer technology has made possible to solve large scale problems in mathematical science. However, numerical results obtained by the usual algorithms with the use of ordinary floating-point arithmetic contain the rounding errors. Unfortunately, classical numerical analysis does not answer the question how accurate the results are. Interval technique is an important tool in numerical computation, by which guarantees and error bounds are obtained for the results.

In this talk, based upon Moore[4] and Kulisch-Miranker[3], the current state of interval algorithms is reviewed.

§1. 区間演算の必要性

〔5〕において，Neumann-Goldstine が数値解析の必要性を訴えて以来，早々くも40年近くが経過した。その後，多くの人々により，各種アルゴリズムの開発と共に，その収束性，安定性等がしらべられ，有益な知見がえられた。就中，行列演算に関するWilkinsonの業績は群を抜く。しかしながら，従来の知識と技法では，実際に方程式 $F(x)=0$ の近似解 $\tilde{x}$ を求めたとき，それが何処まで正しいかについて，厳密に保証を与えることは難しい。よく用いられる便法は次のようなものであろう（〔3〕）。

1．残差 $F(\tilde{x})$ を計算する。$F(\tilde{x})\fallingdotseq 0$ ならば $\tilde{x}$ は良い解である。

2．高精度計算を行ってみる。解がちがわなければ良い解である。

3．データに摂動を入れ，解の変化をみる。変化がゆるやかであれば，問題は安定，解も信用してよい。

しかし，これらはあくまでも便法であって，すべての場合に有効とは云えない。Kulish-Miranker は次の例を与えている。

1．$\begin{pmatrix} 0.780 & 0.563 \\ 0.913 & 0.659 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.217 \\ 0.254 \end{pmatrix}$ $(Ax=b)$ を解く。

$$\tilde{x} = \begin{pmatrix} 0.999 \\ -1.001 \end{pmatrix} \Rightarrow A\tilde{x}-b = \begin{pmatrix} -0.001243 \\ -0.001572 \end{pmatrix}$$

$$\tilde{x} = \begin{pmatrix} 0.341 \\ -0.087 \end{pmatrix} \Rightarrow A\tilde{x}-b = \begin{pmatrix} -0.000001 \\ 0 \end{pmatrix}$$

真の解 $x^* = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

2．$S = 10^{50}+812-10^{50}+10^{55}+511-10^{55}$ を求める。単精度，倍精度，4倍精度何れを用いても出力結果は0。真値は明らかに1323。

3．$\begin{pmatrix} 100000 & 99999 \\ 99999 & 99998 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$ を解く。

$$b = \begin{pmatrix} 200000 \\ 200000 \end{pmatrix} \Rightarrow x = \begin{pmatrix} 200000 \\ -200000 \end{pmatrix}$$

$$b = \begin{pmatrix} 199990 \\ 199990 \end{pmatrix} \Rightarrow x = \begin{pmatrix} 199990 \\ -199990 \end{pmatrix}$$

$$b = \begin{pmatrix} 200010 \\ 200010 \end{pmatrix} \Rightarrow x = \begin{pmatrix} 200010 \\ -200010 \end{pmatrix}$$

しかし

$$\begin{pmatrix} 199990 \\ 199990 \end{pmatrix} \leqq b \leqq \begin{pmatrix} 200010 \\ 200010 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} -1800000 \\ -2200000 \end{pmatrix} \leqq x \leqq \begin{pmatrix} 2200000 \\ 1800000 \end{pmatrix}.$$

特に

$$b=\begin{pmatrix}199999\\199997\end{pmatrix} \Rightarrow x=\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}.$$

電子計算機の出現以来現在まで，解かれる問題は益々複雑となり大型化している。しかし，出力された数値にあまり配慮がなされていないようにみえるのは何故であろうか。上記の例は，結果を盲信することの危険を示している。区間演算は，真値が存在する範囲を区間(あるいは区間ベクトル)として出力し従来のような誤差解析を不要にしようとするものである。数値解析発展の歴史を眺めてみれば，区間演算の出現は必然の流れの上にあるといえよう。

§2. 区間演算における基本概念

区間 $X=[\underline{x},\overline{x}]$，$Y=[\underline{y},\overline{y}]$ に対し，次のものを定義する．

$d(X,Y)=\max(|\underline{x}-\underline{y}|,|\overline{x}-\overline{y}|)$ （X,Yの距離）

$* \in \Omega=\{+,-,\times,/\}$ ，$X*Y=\{x*y \mid x\in X,\ y\in Y\}$ （除算では $0\notin Y$）

$w(X)=\overline{x}-\underline{x}$ （Xの巾），$|X|=\max(|\underline{x}|,|\overline{x}|)$ ，$m(X)=\dfrac{\underline{x}+\overline{x}}{2}$ （Xの中心）.

同様に

$X=\begin{pmatrix}X_1\\ \vdots \\ X_n\end{pmatrix}$ ，$X_i=[\underline{x}_i,\overline{x}_i]$

$w(X)=\max_i w(X_i)$ ，$\|X\|=\max_i|X_i|$ ，$m(X)=\begin{pmatrix}m(X_1)\\ \vdots \\ m(X_n)\end{pmatrix}$

$A=(A_{ij})$ ，$A_{ij}=[\underline{a}_{ij},\overline{a}_{ij}]$ ，

$\|A\|=\max_i\sum_{j=1}^{n}|A_{ij}|$ ，$m(A)=(m(A_{ij}))$

$\mathbb{R}\supset M_i$ $(i=1,2)$

$\mathcal{P}(M_i)$：M_iの巾集合

$g: M_1 \to M_2$

$G: \mathcal{P}(M_1) \to \mathcal{P}(M_2)$

G：gの interval extension $\Leftrightarrow$ 任意の $X\subset\mathcal{P}(M_1)$ に対し $G(x)=g(x)$ ($\forall x\in X$)

interval extension G : inclusion monotonic $\Leftrightarrow (X_1\subseteq X_2 \Rightarrow G(X_1)\subseteq G(X_2))$

また

X_0：区間

$h: X_0 \to \mathbb{R}$

H : an inclusion monotonic interval valued function

とするとき

H：hの interval enclosure $\Leftrightarrow \begin{cases}\text{(i) } X\subseteq X_0 \text{ に対して } H(X) \text{ が定義される.}\\ \text{(ii) } h(x)\in H(x)\ (\forall x\in X_0)\end{cases}$

と定義する。

§3. 有限次元空間における方程式

以下

$$f : D \subseteq R^n \to R^n, \quad f \in C^1(D)$$

$$F, F' : f, f' \text{の inclusion monotonic interval extension}$$

とする.

定理 3.1 (Krawczyk-Moore)

$X^{(0)}$: n次元区間ベクトル, $y^{(0)} = m(X^{(0)})$

$Y^{(0)} = Y$: n次実正則行列

$r_0 = \| I - Y^{(0)} F'(X^{(0)}) \| < 1$

$K(X^{(0)}) = y^{(0)} - Y^{(0)} f(y^{(0)}) + \{ I - Y^{(0)} F'(X^{(0)}) \} (X^{(0)} - y^{(0)})$

$X^{(k)} = K(X^{(k-1)}) \cap X^{(k-1)}$, $y^{(k)} = m(X^{(k)})$,

$Y^{(k)} = \begin{cases} Y & (\| I - Y F'(X^{(k)}) \| \leqq r_{k-1} \text{ のとき}) \\ Y^{(k-1)} & (\| I - Y F'(X^{(k)}) \| > r_{k-1} \text{ のとき}) \end{cases}$

$r_k = \| I - Y^{(k)} F'(X^{(k)}) \|$

$K(X^{(k)}) = y^{(k)} - Y^{(k)} f(y^{(k)}) + \{ I - Y^{(k)} F'(X^{(k)}) \} (X^{(k)} - y^{(k)})$, $k \geqq 1$

$K(X^{(0)}) \subseteq X^{(0)}$

$\Rightarrow$

(i) $\exists_1 x^* \in X^{(0)}$; $f(x^*) = 0$

(ii) $x^* \in X^{(k)} \subseteq X^{(k-1)}$

(iii) $w(X^{(k)}) \leqq r_0^k w(X^{(0)}) \to 0 \ (k \to \infty)$

また

$K(X^{(0)}) \cap X^{(0)} = \phi \Rightarrow X^{(0)}$ 内に解なし.

関数 $\varphi(x_1, \cdots, x_n)$ の極値を求める問題は n元連立方程式

$$f_i(x_1, \cdots, x_n) = \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

を解くこととなるから, 上記定理を用いて, 与えられた領域Dにおけるすべての極値点を探索することができる. その他, 多くの問題に定理3.1が使える。(奥村 [6] も参照のこと.)

定理3.1と Kantorovich の定理は Rall [7] により比較された. 彼の結論は次の通り.

(i) 精度は後者がわずかによい.

(ii) しかし, 前者は後者より計算量が少なく適用しやすい.

また, 南京大学 Zuhe[8]は, 両者の仮定 $K(X^{(0)}) \subset \mathring{X}^{(0)}$ (内点) と $h < \frac{1}{2}$ とが同値であることを示した.

区間 Newton 法

$$N(X^{(k)}) = m(X^{(k)}) - IGA(F'(X^{(k)}), f(m(X^{(k)}))), \quad X^{(k+1)} = N(X^{(k)}) \cap X^{(k)}, k \geqq 0$$

および区間簡易 Newton 法

$$SN(X^{(k)}) = m(X^{(k)}) - IGA(F'(X^{(0)}), f(m(X^{(k)}))), \quad X^{(k+1)} = SN(X^{(k)}) \cap X^{(k)}, k \geqq 0$$

等の研究も多くの人達により試みられている. 但し $IG(A, b)$ は $Ax = b$ を区間 Gauss 法で解いたときの解を表す.

§4. 関数方程式への適用

与えられた関数方程式を

(4.1) $\quad y(t)=p(y)(t)$

の形に書き直す。 次の定義をおく。

$X(t),\ Y(t)$: $a\leqq t\leqq b$ で定義された区間(ベクトル)値関数

$X\subseteq Y \Leftrightarrow X(t)\subseteq Y(t)$, $a\leqq t\leqq b$

$x(t)$: 実数(ベクトル)値関数

$x\in X \Leftrightarrow x(t)\in X(t)$, $a\leqq t\leqq b$

M_r : $a\leqq t\leqq b$ で定義された実数(ベクトル)値関数から成る集合

M : M_r の元の interval enclosure の集合

$p: M_r\to M_r$

$P: M\to M$

P が p の interval majorant $\Leftrightarrow p(y)\in P(Y)$, $y\in Y\in M$

inclusion monotonic $\Leftrightarrow (X\subseteq Y \Rightarrow P(X)\subseteq P(Y))$

定理 4.1 (Moore) P: p の inclusion monotonic interval majorant, $P(Y^{(0)})\subseteq Y^{(0)}\in M$, $Y^{(k+1)}=P(Y^{(k)})$, $k\geqq 0$

$\Rightarrow$

(i) $Y^{(0)}\supseteq Y^{(1)}\supseteq Y^{(2)}\supseteq\cdots$

(ii) $y^*\in Y^{(0)}$: (4.1) の解 $\Rightarrow$ $y^*\in Y^{(k)}$, $k\geqq 0$ i.e. $y^*(t)\in Y^{(k)}(t)$, $a\leqq t\leqq b$

(iii) ${}^\forall X\subseteq Y^{(0)}$, $X\in M$, $\sup_t w(P(X)(t))\leqq c\sup_t w(X(t))$, $0\leqq c<1$

$\Rightarrow$ $\exists_1 y^*\in Y^{(0)}$ ((4.1)の解) かつ $y^*\in Y^{(k)}$, $k\geqq 0$.

例 4.1.1. $y''=f(t,y)$, $y(0)=y(1)=0$

$$\Leftrightarrow y(t)=(t-1)\int_0^t s f(s,y(s))\,ds+t\int_t^1(s-1)f(s,y(s))\,ds\equiv p(y)(t)$$

F: f の inclusion monotonic interval extension

$\Rightarrow$ $P(Y)(t)=(t-1)\int_0^t sF(s,Y(s))\,ds+t\int_t^1(s-1)F(s,Y(s))\,ds$ は p の inclusion monotonic interval majorant

特に $\quad f(t,y)=\frac{3}{2}(y+1+1.126t)^2+0.625t$, $Y^{(0)}=[-0.35,\ 0]$

$\Rightarrow$ $P(Y^{(0)})\subseteq[-1.3755,\ -0.2112](1-t)t\subseteq Y^{(0)}$

$$\sup_{0\leqq t\leqq 1} w(P(X)(t))\leqq c\sup_{0\leqq t\leqq 1} w(X(t))\quad ({}^\forall X\subseteq Y^{(0)})$$

$$\left(c=\frac{3\times 2.26}{8}<1\right)$$

$\therefore$ $\exists_1 y^*\in[-1.3755,\ -0.2112](1-t)t$ ($Y^{(0)}$ で一意的)

$Y^{(k+1)}=P(Y^{(k)})$ $\Rightarrow$ $y^*\in Y^{(k)}$, $k\geqq 0$.

同様に $f(t,y)=(1+ct^2)y+e^{at}$ $(0.9\leqq c\leqq 1.1,\ 0.8\leqq a\leqq 0.9)$ ならば

$\exists_1 y^*\in[-1.65,\ -0.038](1-t)t$

を示すことができる。

例4.1.2. $y'' + \frac{1}{t}y' + \beta e^{-\frac{1}{|y|}} = 0$, $y'(0) = 0$, $y(1) = \tau$, $\beta, \tau > 0$

$$\Leftrightarrow \quad (ty')' = -\beta t\, e^{-\frac{1}{|y|}}$$

$$\Leftrightarrow \quad y(t) = \tau + \beta \int_t^1 \frac{1}{s} \int_0^s u\, e^{-\frac{1}{|y(u)|}}\, du\, ds$$

$$P(Y)(t) = \tau + \beta \int_t^1 \frac{1}{s} \int_0^s u\, e^{-\frac{1}{|Y(u)|}}\, du\, ds$$

$$Y^{(0)} = [\tau, \infty) \Rightarrow P(Y^{(0)})(t) = \tau + \beta \int_t^1 \frac{1}{s} \int_0^s u\, [e^{-\frac{1}{\tau}}, 1]\, du\, ds$$

$$= \tau + \frac{\beta(1-t^2)}{4} [e^{-\frac{1}{\tau}}, 1] \subseteq Y^{(0)}$$

$$\sup_{0 \leqq t \leqq 1} w(P(Y)(t)) \leqq c \sup_{0 \leqq t \leqq 1} w(Y(t)) \quad ({}^{\forall} Y \subseteq P(Y^{(0)})), \quad c = \frac{\beta/(4\tau^2)}{e^{(\tau + \frac{\beta}{4})^{-1}}}$$

故に $(\tau + \frac{\beta}{4}) \log \frac{\beta}{4\tau^2} < 1 \Rightarrow {}^{\exists_1} y^* \in Y^{(1)} = P(Y^{(0)})$ ($Y^{(0)}$においてただ一つ)

§5. 区間演算ソフト ACRITH

Mooreの基本演算

$$* \in \Omega = \{+, -, \times, /\}, \quad x \boxed{*} y = \Box(x * y), \quad x \overset{*}{\nabla} y = \nabla(x*y) \leqq x*y \leqq \Delta(x*y) = x \overset{*}{\Delta} y$$

に加えて，Kulish-Mirankerは 数値計算の主要部をなす積和用演算

$$x \odot y = \bigcirc(x_1 \times y_1 + \cdots + x_n \times y_n), \quad \bigcirc \in \{\Box, \nabla, \Delta\}$$

を用意する。仮数部 l 桁，指数部限界 $e_1 \leqq 0 \leqq e_2$ なる β 進浮動小数点演算（$\pm 0.d_1 d_2 \cdots d_l\, \beta^e$, $0 \leqq d_i < \beta$, $d_1 \neq 0$, $e_1 \leqq e \leqq e_2$）を行う計算機に対して $t + 2e_2 + 2l + 2|e_1|$ 桁のレジスターを用意することにより，最悪でも $n \leqq \beta^t$ 個の積和が正しく計算されて，$x \odot y$ が求まることになる。したがって，出力される区間の巾は著しく縮まり，従来の区間演算の性能は飛躍的に向上する。これが，Kulish-Mirankerによる ACRITH 設計の根本思想である。

References

1.G.Alefeld and J.Herzberger, Introduction to Interval Computation,Academic 1983.

2.E.W.Kaucher and W.L.Miranker, Self-Validating Numerics for Function Spaces Problems,Academic 1984.

3.U.W.Kulisch and W.L.Miranker, The arithmetic of the digital computer: a new approach, SIAM Review 28(1986),1-40.

4.R.E.Moore, Methods and Applications of Interval Analysis, SIAM Publ.1979.

5.J.von Neuman and Goldstine, Numerical inverting of matrices of high order, Bull. A.M.S.53(1947),1021-1099.

6.奥村浩二・佐伯秀一・木島昭，区間解析による非線形回路方程式の求解アルゴリズムに関する一考察，電子通信学会論文誌 69(1986), 489-496.

7.L.B.Rall, A comparison of the existence theorems of Kantorovich and Moore,SIAM J.Numer.Anal.17(1980),148-161.

8.S.Zuhe, On the equivalence of the existence theorems of Kantorovich and Moore, Math.Numer.Sinica 3(1984),319-323.