

微分方程式の境界値問題の精度保証付き数値計算における丸め誤差

金井 章浩 久保田 光一
中央大学大学院理工学研究科[†]

1 はじめに

解析的に解くことが難しい微分方程式の境界値問題は、計算機を用いて有限要素法などを使って数値計算により解を求める。しかし、求めた結果は誤差が含まれる。その誤差がどの程度の大きさであるか、その限界を保証することを精度保証付き数値計算という [3]。

本研究では九州大学の中尾充宏教授のグループにより提案されている微分方程式の精度保証付き数値計算アルゴリズム [3, 5] を実装し、数値実験を行う。その結果から得られる誤差評価は、モデル化誤差、離散化誤差、丸め誤差を含むものである。そこで丸め誤差に着目する。丸め誤差は離散化誤差に比べて小さいとされているが、高速自動微分を利用した累積丸め誤差評価を行い、中尾氏らの手法においてどの程度丸め誤差が影響を及ぼしているか考察する。

2 微分方程式の境界値問題の精度保証付き数値計算

中尾教授らにより提案されている微分方程式の境界値問題の精度保証付き数値計算アルゴリズムは、有限要素法の誤差評価式と区間演算を用いて誤差の大きさを自動的に見積もり、不動点定理により、真の解を含む集合を導出するというものである [3, 5]。その手順は以下のとおりである。

- (1) 有限要素法などにより近似解を求める。
- (2) 近似解をもとに問題の不動点定式化を行う。
- (3) 解を含むと期待される候補者集合を決める。
- (4) 候補者集合が不動点定理に基づく検証条件を満たせば、候補者集合は真の解を含むので終了。満たさなければ (3) に戻る。

2.1 不動点定理に基づく検証条件

候補者集合 U が有界凸閉集合、 F をコンパクト作用素とする。 U の F による写像 $F(U)$ が $F(U) \subset U$ を満たすとき、 U の中に不動点方程式 $u = F(u)$ の真の解が存在する。

[†]Round-off errors in numerical computation for solving boundary value problems of differential equations with guaranteed accuracy, Akihiro KANAI and Koichi KUBOTA, Graduate School of Science and Engineering, Chuo University, 1-13-27 Kasuga, Bunkyo-ku, Tokyo 112-8551, Japan.

$U, F(U)$ は無限次元であるため計算機では表現できない。そこで有限要素空間 S_h の部分集合 U_h 、その直交補空間 S_h^\perp の部分集合 U^\perp とに分けて考える。このような $U = U_h + U^\perp$ に対し、 $P_h : H_0^1(\Omega) \rightarrow S_h$ を用いて

$$\begin{cases} P_h F(U) \subset U_h, \\ (I - P_h)F(U) \subset U^\perp \end{cases}$$

が成り立つならば、真の解が U の中に存在する。この式が検証条件となる。検証条件 $(I - P_h)F(U) \subset U^\perp$ を計算するには有限要素法を用いたことにより発生する誤差を評価した値が必要となる。

2.2 有限要素法の誤差評価式

本研究では主に 2 次元定常流れの問題を扱う。例えば以下のような Stokes 方程式を考える。

$$\begin{cases} -\nu \Delta u + \nabla p = f & \text{in } \Omega, \\ \operatorname{div} u = 0 & \text{in } \Omega, \\ u = 0 & \text{on } \partial\Omega \end{cases} \quad (2.1)$$

ここで Ω は凸多角形領域、 $u = (u_1, u_2)^T$ は速度場、 p は圧力場、 $\nu > 0$ は粘性係数、 $f = (f_1, f_2)^T$ は 2 次元ベクトル値関数である。(2.1) は不動点問題 $u = Fu$ に書き直せる [4]。

(2.1) のような Stokes 方程式に対し、有限要素法を用いたときの a posteriori 誤差評価式は

$$\begin{cases} \|u - u_h\|_{H_0^1(\Omega)} \leq \left(\frac{1}{\nu^2} + \frac{1}{\beta^2} \right)^{\frac{1}{2}} C(u_h, p_h), \\ \|p - p_h\|_{L^2(\Omega)} \leq \left(\frac{1}{\beta} + \frac{\nu}{\beta^2} \right) C(u_h, p_h), \end{cases}$$

$$C(u_h, p_h) \equiv \nu \|\bar{\nabla} u_h - \nabla u_h\|_{L^2(\Omega)}$$

$$+ C_0 h \|\nu \bar{\Delta} u_h - \nabla p_h + f\|_{L^2(\Omega)} + \|\operatorname{div} u_h\|_{L^2(\Omega)}$$

である [2]。ここで Ω が正方領域ならば $1/\beta < 2.614$ であり、2次元矩形要素ならば $C_0 = 1/(2\pi)$ である。

この誤差評価式で得られる値は離散化誤差を評価したものである。この値を用いて検証を行う。実際には有限要素法を用いて近似解を得るときに累積丸め誤差が発生する。この累積丸め誤差が検証の可否を左右する要因になるのかどうかを調べる。

3 累積丸め誤差評価

丸め誤差の事後誤差評価を行うためには、すべての途中結果の摂動に関する最終結果の感度の値が必要になる。そこで高速自動微分を用いる。高速自動微分は、アルゴリズムを実行するときに計算の履歴を残しておき、その履歴を遡りながら偏導関数値を計算する方法で、この導出過程は累積丸め誤差の近似式の導出と同じである [1]。

計算過程の各計算ステップにおいて、入力変数 x_j 、入力定数 c_j の誤差を $\Delta x_j, \Delta c_j$ と表す。 $v_r = f(x)$ の計算において、発生誤差 δ_k を考慮した各計算ステップの累積誤差は $\tilde{v}_k - v_k$ と表され、最終結果の累積丸め誤差 $\Delta f \equiv \tilde{v}_r - v_r$ は以下で近似できる。

$$\tilde{v}_r - v_r \simeq \sum_{k=1}^r \left. \frac{\partial f}{\partial v_k} \right|_{H_{v_k}^{v_r}} \delta_k + \sum_{j=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_j} \Delta x_j + \sum_{j=1}^q \frac{\partial f}{\partial c_j} \Delta c_j$$

右辺第 1 項が累積丸め誤差の近似式である。また浮動小数点数 \tilde{v}_k を計算結果として得た場合の発生誤差 δ_k について $|\delta_k| \leq M(\tilde{v}_k)\epsilon_M$ となることから、以下の累積丸め誤差の絶対評価 $\Delta_A v_r$ を得る。

$$\Delta_A v_r \equiv \left(\sum_{k=1}^r \left| \left. \frac{\partial f}{\partial v_k} \right|_{H_{v_k}^{v_r}} M(\tilde{v}_k) \right| \right) \epsilon_M$$

また、発生誤差を一種の確率変数とみなすとし、一様分布に従う独立な確率変数を仮定すると、以下の 0 捨 1 入としたときの丸め誤差の確率評価 $\Delta_P v_r$ を得る。

$$\Delta_P v_r \equiv \left(\sqrt{\frac{1}{3} \sum_{k=1}^r \left(\left. \frac{\partial f}{\partial v_k} \right|_{H_{v_k}^{v_r}} M(\tilde{v}_k) \right)^2} \right) \epsilon_M$$

4 数値実験

Stokes 方程式 (2.1) の精度保証付き数値計算を行う。 $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$, $f_1 = 0$,

$$\begin{aligned} f_2 &= 8(10x - 30x^2 + 30x^3 - 15x^4 + 6x^5 - 60xy \\ &\quad + 180x^2y - 120x^3y - 15y^2 + 90xy^2 - 180x^2y^2 \\ &\quad + 120x^3y^2 + 30y^3 - 60xy^3 - 14y^4 + 30xy^4) \end{aligned}$$

とし、 $x = 0$ のとき $p = 0$ とする。

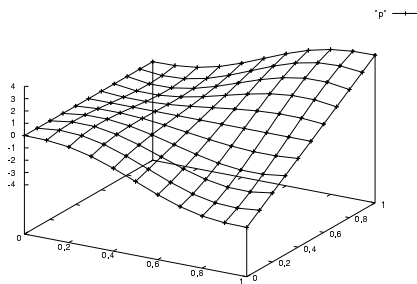


図 1 圧力場 p

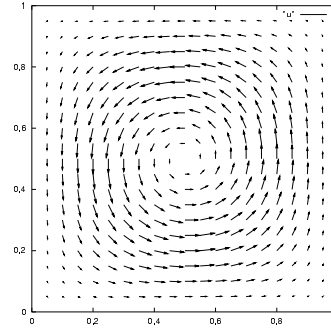


図 2 速度場 u

このときの真の解は図 1, 図 2 のようになる。前述の a posteriori 誤差評価値を求め、検証を行い、真の解を含むような候補者集合を導出する。さらに累積丸め誤差評価値を求め、検証に大きく影響を及ぼしているか調べる。

5 まとめ

2 次元定常流れ問題について、累積丸め誤差を考慮した精度保証付き数値計算を行った。中尾氏の手法において、累積丸め誤差が検証の可否に大きく影響を及ぼすことはないことが確認できた。

今後の課題は累積丸め誤差評価を考慮して精度保証付き数値計算を行うとき、高速自動微分を利用したときと、既存の精度保証ソフトを用いたときの検証結果、計算時間の比較等を行いたい。

参考文献

- [1] 久保田光一, 伊理正夫: **アルゴリズムの自動微分と応用**, コロナ社, 東京, 1998.
- [2] Mitsuhiro T. Nakao, Nobito Yamamoto and Yoshitaka Watanabe: A Posteriori and Constructive A Priori Error Bounds for Finite Element Solutions of the Stokes Equations, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol.91(1998), pp.137-158.
- [3] 中尾充宏, 山本野人: **精度保証付き数値計算**, 日本評論社, 東京, 1998.
- [4] Yoshitaka Watanabe, Nobito Yamamoto and Mitsuhiro T. Nakao: A Numerical Verification for the Navier-Stokes Equations, *Reliable Computing*, Vol.5, No.3(1999), pp.347-357.
- [5] 渡部善隆, 中尾充宏: 精度保証付きシミュレーション [4] 一偏微分方程式の精度保証一, シミュレーション, Vol.19, No.3(2000), pp.208-215.