数 値 解 析 27－7
（1 9 8 8. 1 2. 2）

数値計算の品質保証に関する動向

—関数方程式に対する数値的検証法を中心として—

中尾充宏
九州大学 理学部 数学教室

本報告では、科学計算における信頼性に関する技術動向について述べる。昨年（1987年）秋、米国オハイオで開催された区間解析法にもとづく計算の信頼性に対する国際研究集会の報告も兼ねて，特に，微分方程式等の関数方程式の解を数値的に検証する技法について紹介する。

Recent advances on the reliability in scientific computing

On the state of the art of numerical verification for functional equations

Mitsuhiro T. Nakao
Department of Mathematics, Faculty of Science, Kyushu University
Hakozaki, Higashi-ku, Fukuoka, 812, Japan

In this report, we describe the state of the art on the reliability in scientific computing. Particularly, we introduce several existing techniques for verified computation for infinite dimensional problems that take into account the international workshop on the role of interval method in scientific computing in Ohio USA 1987.

1. はじめに

最近になって数値計算の信頼性の問題がしばしば話題としてとり上げられるようになり，それに伴い科学計算における区間解析法の効用が改めて見直され始めている。 筆者は数年前，文献［1］に接したのがもとで無限次元の問題に対する数値計算の信頼性，即ち関数方程式の真の解を計算機を用いて数値的に立証することに関心をもつようになった。そこでは当然，連立方程式の精度保証付区間解の様な有限計算の信頼性も問題となるため，最近の区間演算技術の動向にも注意を払っている。 昨年（1987年）9月米国オハイオ州で開かれたそれらの関連技法に関する国際会議に参加する機会を得たので，ここではその時の会議の様子などを含めて、主として関数空間的問題の品質保証法に係わる話題をすこし紹介したい。

2. オハイオ国際会議

会議は "the role of interval method in scientific computing" と題して1987年9月8日から11日まで米国オハイオ州の州都コロンバスのホテル Hyatt on Capitol Square にて開催された。 organizer は区間解析法の創始者として知られるオハイオ州立大学計算機情報科学科の R. Moore 教授であったが，IBM，カールスルーエ大学(西独)，ベル研及び DFG（ドイツ研究協会）が後援しており，講演者の多くがこれらの関係者で占められていた。 出席者は約60名で招待講演者以外は殆んどが米国内からの参加であった。 会議は、Computer arithmetic & mathematical software，Linear & nonlinear systems，Optimization 及び Operator equations の4つのセションに分かれてそれぞれに1日が割当てられた。 各セションは3～7の招待講演とそれに続くパネル討論及びポスターセションから成っており，応募形式のいわゆる一般講演は組まれていなかった。

各セションの主な講演題目と講演者は次の通り。

1) Computer arithmetic and mathematical software
- ベクトルプロセッサ向き演算法（U. Kulisch，カールスルーエ大学）
- FORTRAN-SC とプログラム例（W. Walter，M. Metzger，カールスルーエ）
- PASCAL-SC の信頼度評価（J. W. von Gudenberg，カールスルーエ）
- 検証アルゴリズムの理論と実際（S. M. Rump，IBM）
- Differential arithmetic の応用（G. F. Corliss，マーケット大学）

2) Linear and nonlinear systems
- 区間収束の加速法（K. Nickel，フライブルク大学）
- 区間連立方程式の解法（J. Rohn，チャールズ大学）
- パラメータを含む方程式の解集合計算における誤差（W. Rheinboldt，ピッツバーグ大学）
- パラメータに依存する方程式の零点の包含集合（A. Neumaier，フライブルク大学）

3) Optimization
- 区間解析を用いた大域的最適問題の概観（E. R. Hansen，ロッキード社）
- computational optimization における最近の動向（R. Tapia，ライス大学）

4) Operator equations

・作用素方程式に対する区間解析法(S. Zuhe, 南京大学)

・関数空間的問題に対する保証付計算(W. L. Miranker, IBM)

これらの中りくつかの講演の特徴的な事項とパネル討論の中での印象に残った指摘については当研究会発表時に述べる。なおこれらの講演のProceedingsは「Reliability in Computing」(ed. R. E. Moore)というタイトルで既にAcademic Pressから出版されている[4]。

3. 関数方程式に対する数値計算的検証技法

ここでは関数方程式の解の存在と一意性の問題に対する数値計算的アプローチとして、先の国際会議で発表されたS. Zuhe及びW. L. Mirankerの手法と筆者自身による方法の概要を述べその特徴、問題点について考察する。

1) Zuheの方法[5]。

関数方程式を

① $$Ly = f(t, y) \qquad t \in R^n, \quad y \in D \subset B$$

の形で考える。ここに、Lは線型微分作用素, $f(t, y) \in C^1(R^n \times D)$, Bは適当なBanach空間とする。更に、

② $$F[y] \equiv Ly - f(t, y)$$

とおき、$y_0, y_1 \in D$に対し、Fが次のTaylor展開をもつとする。

③ $$F[y_1] = F[y_0] + F'[y_0][y_1 - y_0] + \frac{1}{2}F''(\xi)[y_1 - y_0]^2 \qquad (\exists \xi \in D)$$

ここに、F', F''はFのyに関するFréchet微分。

いま、関数方程式 $F[y] = 0$ を次の不動点形式で考える。

④ $$p[y] \equiv y - YF[y] = y$$

ここで、Yは逆作用素をもつ適当な線型作用素とする。

このとき、固定されたy_0に対し、$F'[y_0]^{-1}$が存在するものとし、そのときの④の解をy_1とする。いま、$X(t)$を$y_0(t)$, $y_1(t)$を共に含む区間多項式(interval polynomial)とし、$F''(X)$が$F''(y)$の区間拡張(inclusion monotonic interval extension)として定義できるとする。

このとき、$Y = F'[y_0]^{-1}$に対する④の$P[y]$の区間拡張として次の$P(X)$が定義される。

⑤ $$P(X)(t) \equiv y_0(t) - F'[y_0]^{-1}F[y_0](t) - \frac{1}{2}F'[y_0]^{-1}F''(X)(X(t) - y_0)^2(t)$$

③～⑤から $y_1(t) \in P(X)(t)$ となる。

次に、一般の$X(t)$に対し、Mを $y(t) \in X(t) \quad \forall t \in R^n$ を満たすBの凸閉部分集合とする。いま、④で定義されたPがM上のコンパクト作用素ならば、次の定理が成立つ。

定理.

⑥ $P(X)(t) \subset X(t) \quad \forall t \in R^n$ ならば $y(t) \in X(t)$ なる④の解が少なくとも1つ存在する。

この定式化の下に Zuhe は，常微分方程式の初期値問題，非線型2点境界値問題，及び非線型楕円型境界値問題のいくつかの例について⑥を満たす $X(t)$ が作れるための条件を示した。しかしながら，実際に与えられた具体的な方程式について computational に $X(t)$ を構成した例は示されず，筆者が彼自身に問い質したところ，今後の課題であり まだ見通しはなり模様である。例えば，楕円型問題に対しては $F'[y_0]^{-1}$ を評価するために，Green 関数を直接評価せねばならず，一般的には計算機で自動的にとはいきそうにない様である。

2) Kaucher & Miranker の方法[2]

会議での報告は Miranker が行ったが その内容は 文献[1]と本質的に同じであった。彼らの目標は次の3つの技術を結びつけた品質保証された関数方程式の近似解法に関するエキスパート システムの構築である。

i) E-method*)

関数方程式に対し不動点定理を用いて解の存在，一意性，存在範囲の特定を computational に立証する方法。

*) Existenz , Eindeutigkeit , Einschließung

ii) Ultra-arithmetic

関数の級数展開法を利用して，計算機内部で扱う全ての関数を関数型データタイプとして有限級数表示し，その間の演算（四則，積分）を定義することにより，関数方程式の近似解を代数方程式の解法と同様に求めようとする試み。

iii) Computer-arithmetic

ultra-arithmetic と E-method を実際に計算機上で実現するために必要な，計算機内部での arithmetic operation の実現技法で，品質保証された高精度の有限計算技術（eg. ACRITH など）のこと。

その基本的な実現方法を述べる。

$\mathcal{M}$: 可分な Hilbert 空間，　$\Phi = \{\varphi_k\}_{k=0}^{\infty}$: $\mathcal{M}$ の基底

$S_N(\mathcal{M})$: $\Phi_N = \{\varphi_k\}_{k=0}^{N}$ で張られる $\mathcal{M}$ の部分空間

$S_N : \mathcal{M} \to S_N(\mathcal{M})$: rounding operator

${}^{\forall} f \in \mathcal{M}$ に対し．　$S_N f$: f の rounding

$(I - S_N) f$: f の rounding error

S_N の条件： $f \in S_N(\mathcal{M}) \Rightarrow S_N f = f$ （したがって通常 S_N は projection）

$S_N(\mathcal{M})$ の中で関数方程式の近似解を考える。$S_N(\mathcal{M})$ は計算機内では係数空間 $R_N(\mathcal{M})$ として表現（関数型データ・タイプ）。

$S_N(\mathcal{M})$ には rounding を考慮した演算構造（ultra arithmetic）（$S_N(\mathcal{M})$: $\boxplus$，$\boxminus$，$\boxdot$，$\boxtimes$，$\boxed{/}$）が導入される。

これによって，$\mathcal{M}$ での関数方程式 $\mathcal{L}y = 0$ は $S_N(\mathcal{M})$ での方程式 $\mathcal{L}_N y_N = 0$ として代数方程式の様に扱われる。

更に、解の検証(validation)のためには、interval functoid の空間 $IS_N(M)$ という概念が用いられる。これは係数空間 $\mathcal{R}_N(M)$ を区間にしたもので、Φ_N の要素の区間係数1次結合の全体である。但し、そこでは、表現される関数の集合はグラフの意味で解釈される。

例えば、

$$F(x) \equiv \sum_{k=0}^{N} A_k x^k \Rightarrow F(x) = \left\{ f \mid f(x) \in \sum_{k=0}^{N} A_k x^k ,\ \forall x \in R^1 \right\}$$

$IS_N(M)$ 上には演算構造(interval ultra-arithmetic)($IS_N(M)$; $\oplus, \ominus, \odot, \oslash, \oint$)が定義される。区間係数1次結合をグラフの意味で解釈するため微分演算は定義されない。$IS_N(M)$ 上の表現を用いて $F(X) \subset X$ の形の検証手順が記述される。

この手法は、関数方程式の近似解の計算と真の解の検証を一貫して極めて系統的に計算機内で行う原理の確立を目ざすものであり、その意味で画期的である。積分方程式、微分方程式、固有値問題等でいくつかの数値例が示されそれらを見る限り極めて高精度に保証付計算がなされているが、今一つ説得力に欠ける。その1つは、具体例に関し、包含関係 $F(X) \subset X$ を得るための手順が殆んど説明されていない点である。また、打切り誤差の影響がどの様な原理でどこに吸収されているのか不明であり、都合の良い例だけを扱っているのではないかとの疑問が解消できない。更に、微分方程式を全て積分方程式に変換しなければならないため偏微分方程式に対する適用が困難であり、有限要素法との親和性にも欠けると思われる。

3) 中尾[7]の方法

これは筆者が主として楕円型境界値問題の解の存在検証を行うことをねらって導入したものであり、有限要素法の誤差解析を道具として用いている。

例えば、線型問題の場合、領域 Ω での Dirichlet 問題を

$$① \quad \begin{cases} -\Delta u + b \cdot \nabla u + cu = f & \text{in } \Omega \\ u = 0 & \text{on } \partial\Omega \end{cases}$$

とするとき、この弱解を見つける空間を H とすると、適当なコンパクト作用素 $T: H \to H$ を導入することができ ① は $Tu = u$ の形の不動点表示ができる。適当な有限要素空間 $S_h(\Omega) \subset H$ を用意して直交射影 $R: H \to S_h(\Omega)$ を考える。R は前述の Miranker 方式における rounding に相当する。したがって rounding error は

$u \in H \Rightarrow \quad RE(u) = (I - R)(u) \in S_h^{\perp}$.　よって、いま、$\exists U \subset H$ に対し

$$R(SU) \oplus RE(SU) \overset{\circ}{\subset} U \qquad \left(M_1 \overset{\circ}{\subset} M_2 \overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow} \overline{M}_1 \subset \overset{\circ}{M}_2 \right)$$

が成立てば U の中に ① の解の存在と一意性が保証される。[7]ではこの様な集合 U を計算機内で自動的に生成するための手順とその計算例とが与えられている。また[8]では作用素 T のスペクトル半径が大きい場合への対処方法が、[9]には、非線型楕円型方程式への適用例が述べられている。

この方法の特徴は、関数の集合 U を $S_h(\Omega)$ の基底関数の区間係数1次結合 u_h とその誤差限界 α を表わすパラメータの対として表現し、しかも u_h をグラフの

意味では解釈せず，単なる基底関数の1次結合の集合とみなす点と，実数 α はその実体としては，有限要素近似の誤差が属する集合 $[\alpha] \subset S_h^{\perp}$ を表わすため，$U = u_h \oplus \alpha$ はその微分も評価できる点にある。このため偏微分方程式の最も有力な近似解法である有限要素法との親和性が極めて良くなっている。

4. 考察.

オハイオ国際会議の全体的印象からも，数値計算の信頼性という観点から区間解析法の有効性が実証されつつあることは事実であろう。この手法により科学計算における浮動小数点演算の結果に整数計算と同じ100%の信頼性（但し，解が保証区間に入っているという意味で）が与えられたわけである。現在既に計算機はその整数計算の信頼性故に数学に於て組合せ論的な分野で，また数式処理の応用としての利用が定着しているが，今後解析学の分野に於てもその利用の道が開かれてくるものと期待される。実際，数理物理におけるLanfordの研究[3]や我国でも，京大の西田氏の研究などにその萌芽が見られる。数値解析を専攻する者にとってこれらの研究に役立つ手法を開発することは一つの任務であろう。

参考文献

[1] E.W. Kaucher & W.L. Miranker, *Self-validating numerics for function space problems*, Academic Press, New York, 1984.

[2] ———, Validating computation in a function space, in [4].

[3] O.E. Lanford III, Computer assisted proofs in analysis, Physica 124 A, 465-470, 1984.

[4] R.E. Moore (ed.), *Reliability in computing – the role of interval methods in scientific computing*, Academic Press, New York, 1988.

[5] R.E. Moore & S. Zuhe, Interval methods for operator equations, in [4].

[6] U. Kulisch & W.L. Miranker, *A new approach to scientific computation*, Academic Press, New York, 1983.

[7] M.T. Nakao, A numerical approach to the proof of existence of solutions for elliptic problems, Japan Journal of Applied Mathematics, 313-332, 1988.

[8] ———, ——— Part II : for the case of large spectral radius, RMC 63-06, Kyushu Univ., 22 pages, 1988.

[9] ———, A computational verification method of existence of solutions for nonlinear elliptic problems, RMC 63-07, Kyushu Univ., 20 pages, 1988.