早稲田大学大学院理工学研究科

博 士 論 文 概 要

論 文 題 目

非線形方程式の解の
精度保証付き数値計算に関する研究

申 請 者
柏木 雅英
Masahide Kashiwagi

電気工学専攻 情報数理工学研究

平成 5 年 12 月

現在の電子計算機による数値計算は，浮動小数点演算を基礎としている．この浮動小数点演算による計算には必ず誤差が伴い，電子計算機の誕生当初から問題点として認識されてきた．その結果，アルゴリズムの安定性等について多くの知見が得られ，多くの優れたアルゴリズムは誤差の影響がなるべく小さくなるように設計されている．しかし，実際の計算において丸め誤差の影響をすべて把握することは難しく，既存の数値計算法の大半は，計算結果の精度について確実な保証を与えることは出来ない．計算機自身に数値計算を行うと同時に結果の精度の保証を行わせるという発想とその研究は古くから行われてきた．精度保証付き数値計算と呼ばれるようになったこの分野は，近年急速な発展を見せ，今後の数値計算法のあるべき姿として世界的に注目を集めている．

丸め誤差の追跡を行う上で現在主流になっているのは，区間演算と呼ばれる手法である．これは，すべての数値を [下限, 上限] というペアで表現し，区間と区間の演算で答えの区間を求めるものである．

ところで，方程式の解の精度保証には単なる誤差の追跡とは異なった別のアプローチが必要である．ここで重要な役割を果たすのは，関数解析の分野で基本的ないくつかの不動点定理であり，また Kantorovich をはじめとする Newton 法の収束定理である．方程式を同値な不動点問題に置き換え，不動点定理の成立を数値的に確かめることによって解の存在保証と誤差評価を行う．よってこの場合本質的な役割を果たすのは不動点定理であり，区間演算は存在条件の成立を厳密に確かめるために用いられる．一方，これらの不動点定理の多くは Banach 空間などの空間上で議論されており，これらの定理を用いて有限次元の非線形方程式に留まらず無限次元の関数方程式の解の精度保証が行える可能性がある．

本論文は，このような精度保証技法に関する現状を踏まえて，特に非線形方程式の解の精度保証に関する研究成果をまとめたものである．

本論文の前半 (第 3–6 章) では，有限次元の非線形方程式に対して，近似解を元にしたほぼ自動的な精度保証システムの構築に関する研究成果について述べる．ここでは，“ $a_i \le x \le b_i$, $b_i - a_i \to 0$ を満たす列 $\{a_i, b_i\}$ を計算するプログラムが計算機上に実現” されたとき，実数 x は精度保証されたと考えることにする．すなわち，方程式の解が “精度保証された” ということは，区間 $[a_i, b_i]$ に必ず真の解が含まれていることの保証と，いくらでも精度の良い解を得ることが出来ることの保証という二重の意味を持っている．

本論文の後半では，方程式に幾つかのパラメータが付加された場合など，定義域の次元が値域の次元よりも高いような方程式の解の包み込みについて論ずる．この次元の差が n ならば解の集合は一般に n 次元多様体となるが，これを包みこむ事を考える．これは，パラメータによる分岐現象等の解析や変動が加わった方程式の解析など，様々な非線形現象の解析の基礎となる．

第 1 章「序論」では，本研究が行われた背景として精度保証付き数値計算に関する現状が記述され，本論文の目的，概要，構成が述べられる．

第 2 章「区間解析」では，本論文の議論の基礎となる区間解析について説明される．まず，区間解析で基本となる区間演算がその用語とともに定義される．次に，区間演算を用いた非線形方程式の解の精度保証技法の基本的かつ代表的なものとして，Krawczyk の区間写像を用いた方法について説明される．

第 3 章「計算機上における関数の表現法」では，厳密な精度保証のために不可欠な，方程式の計算機上での表現方法について議論される．実数値連続関数を計算機上に厳密に情報落ちすることなく載せることを目的としている．そのために，従来の浮動小数点数に代わって，有理数演算が採用される．更に，計算誤差の影響を把握出来るように区間演算が採用される．また，こうして定義された区間写像から元の関数についての情報を完全に取り出せる (元の関数の定義となっている) ことを保証するための出来る限り緩くかつ確認しやすい条件として，連続な区間包囲の概念が提案される．

第 4 章「区間演算による近似解の包み込み」では，Krawczyk の方法を元として，適当な方法で得られた近似解を用いる精度保証アルゴリズムが提案される．Krawczyk の方法は，与えられた領域に対してそこに解があるかどうかを確認するものである．よって，本論文で対象とするような与えられた近似解に対してその近くにあるであろう真の解を包みこむような目的の場合には，近似解をを元にして真の解を含みそうな適当な領域を与えてやる必要があった．本章では，この領域の決定法が示される．そしてこの決定法を元にし，また第 3 章で提案したような関数表現を仮定して，与えられた近似解を用いた真解の包み込みアルゴリズムが示される．また，このアルゴリズムが十分良い近似解に対して有効である事が示される．

第 5 章「有理数演算による反復改良」では，任意精度までの反復改良を行うアルゴリズムが提案される．仮に無限精度の区間演算が行えたとすれば任意精度までの反復改良は Krawczyk の方法により容易に行える．しかし，実際にはそれは不可能である．ここでは，第 3 章で提案した関数表現を仮定し，また有理数演算を用いた区間反復法が提案される．この方法では，適切に制御された有理数の丸めによって，有理数の桁数の爆発の防止と任意精度までの反復改良が同時に達成されている．また，それが正しく動く事が証明される．

第 6 章「精度保証システムの実現」では，精度保証システムの実際の実現について議論される．まず，本論文 (第 3–5 章) で提案した方法を含め，様々な精度保証の方法を実現するために必要なプログラミング技法について議論される．次に，本論文で提案したアルゴリズムを実際に試作した方法について説明される．自動微分の技法を用い，方程式と近似解の 2 つの入力だけで自動的に精度保証を行うシステムの構築が出来たことが示される．最後に，幾つかの例題に対する精度保証が行われその有用性が示される．

第 7 章「構成的陰関数定理による非線形システムの数値解析」では，方程式に幾つかのパラメータが付加された場合など，定義域の次元が値域の次元よりも高いような方程式の解の包み込みについて論じられる．

まず，これ以降の議論の基礎となる，簡易 Newton 法の収束定理である占部の定理について議論される．次に，陰関数定理を拡張し，その成立範囲を見積もれるような構成的陰関数定理が占部の定理を元に導かれる．更に，導関数の Lipschitz 連続性を仮定し，同様な定理が導かれる．

また，構成的陰関数定理の応用例の一つとして，ホモトピー法の解曲線追跡の新しい方法が提案される．まず，ホモトピー法について簡単に説明される．次に，解曲線追跡法の一つである予測子修正子法の改良として，決して失敗しないような新しい解曲線追跡法が構成的陰関数定理を用いて導かれる．また，その解曲線追跡法について実際の適用に関する詳細な議論が展開される．最後に，シミュレーションによってその有効性が示される．

第 8 章「結論」では本論文の結論として，まとめと今後の展望が述べられる．