main : 2011/06/02(08:54)

チュートリアル

精度保証付き数値計算 (1)
—不動点定式化

渡部 善隆

1 はじめに

「精度保証付き数値計算」とは,

> 与えられた問題（数学モデル）の解の存在範囲もしくは一意存在の範囲を丸め誤差の厳密評価を含めて特定する算法
>
> （現代数理科学事典・第 2 版, 丸善）

です．また，そもそも解が存在するかどうか分からない問題に取り組む場合には,「解の存在証明」も精度保証付き数値計算の重要な目的となります.

微分方程式に代表される連続問題に対して数値計算を適用する過程では，離散化誤差，打ち切り誤差，丸め誤差と呼ばれるレベルの異なる誤差の混入が避けられません [1]．解の存在証明やその存在範囲を特定するためには，これらの誤差それぞれを数学的に厳密な意味で見積もるための理論・算法・実装技術を総動員する必要があります．したがって，精度保証付き数値計算の守備範囲は，関数解析，微積分，線形代数，丸め誤差の制御技術，効率的なプログラミングなどの幅広い領域にわたり，しかも，各分野とも独立した研究テーマとなる深みを持っています.

筆者には，この広いスペクトルを持つ計算手法を俯瞰し，的確かつ遺漏なく紹介する力量はとてもありません．そこで，本チュートリアルでは，偏微分方程式の境界値問題を念頭におき,「非線形方程式に対する解の存在証明」を切り口にして，定式化から解の存在検証と誤差評価が完了するまでの道のりを，できるだけ丁寧に描き出してみたいと思います．この切り口を参考に，離散化誤差，打ち切り誤差，丸め誤差の評価のために, どのような理論・算法・実装技術が動員されるかを理解していただければ幸いです.

第 1 回は，離散化によって得られる（ことの多い) 近似解を用いた不動点定式化です．自己充足な形を狙い，関数解析学の用語集を付録につけました．用語の詳細は，文献 [2, 3] を参照願います.

2 Newton 型不動点定式化

この章では，無限次元（基底が無限個）の非線形方程式に対する定式化の「定石」を紹介します.

2.1 問題設定

Banach 空間$^{(A1)}$$X, Y$ と作用素 $F : X \to Y$ に対し，方程式:

$$F(u) = 0 \tag{2.1}$$

を満たす $u \in X$ を求める問題を考えます†1．作用素 F は一般に非線形†2です.

2.2 Newton 法

非線形方程式に対するもっともよく知られた解法のひとつは, Newton 法(あるいは Newton-Raphson

わたなべ よしたか．九州大学情報基盤研究開発センター.

†1 以降，非線形作用素は $F(u)$，$\hat{u}$ での Fréchet 微分$^{(A2)}$を $F'[\hat{u}]$，線形作用素は括弧なしで Lu などと表記します.

†2 $a, b \in \mathbb{C}$, $u, v \in X$ に対し，$F(au + bv) = aF(u) + bF(v)$ が《必ずしも成立しない》作用素です.

法）です [4, 5]．Newton 法は，局所的な線形近似の繰り返しによる解への接近方法です．

まず，方程式 (2.1) に対し，形式的に Newton 法を適用します．すると，初期値 $u_0 \in X$ と $n = 0, 1, 2, \ldots$ に対する反復:

$$u_{n+1} = u_n - F'[u_n]^{-1}F(u_n) \qquad (2.2)$$

を得ます．ここで，$F'[u_n] : X \to Y$ は F の u_n における線形化作用素，すなわち Fréchet 微分$^{(A2)}$ であり，$F'[u_n]^{-1} : Y \to X$ はその逆作用素です．

F が有限次元ベクトル空間 $\mathbb{C}^N (N \geq 1)$ 上の写像の場合，$F'[u_n]$ は Jacobi 行列となり，式 (2.2) 中の $F'[u_n]^{-1}F(u_n) \in \mathbb{C}^N$ は，連立 1 次方程式: $F'[u_n]\boldsymbol{x} = F(u_n)$ の解ベクトル $\boldsymbol{x}$ に対応します．

2.3　簡易 Newton 法

次に，Newton 反復式 (2.2) において，反復の度に $F'[u_n]^{-1}$ を更新しなくても，$\{u_n\}$ が速やかに収束することを期待します．そして，その期待のもと，$F'[u_n]^{-1}$ をある固定した線形作用素 $L : X \to Y$ の逆作用素 $L^{-1} : Y \to X$ で置き換えた反復:

$$u_{n+1} = u_n - L^{-1}F(u_n) \qquad (2.3)$$

を考えます．式 (2.3) による反復列 $\{u_n\}$ の生成法を，簡易 Newton 法と呼びます[†3]．

線形作用素 L の選択には任意性があります．代表的な選択方法は，何らかの方法で得られた式 (2.1) の近似解 $\hat{u} \in X$ に対して，

$$L = F'[\hat{u}] \qquad (2.4)$$

と定めることです．また，式 (2.3) の定義では，F の微分可能性は必ずしも要請しませんので，F が Fréchet 微分できない問題に対しても（定式化としては）拡張することができます．

線形作用素 L の可逆性，すなわち L^{-1} が存在するかどうかの確認は，解の精度保証の主要テーマのひとつです．ここでは，L の可逆性を仮定して先に進みます．

†3　文献によっては簡易 Newton 法を $L = F'[u_0]^{-1}$ に限定する場合もあります．ここでは拡張して考えています．

2.4　残差形

式 (2.3) の右辺を L^{-1} で括り，

$$u_{n+1} = L^{-1}(\ Lu_n - F(u_n)\ ) \qquad (2.5)$$

と書き直します．ここで，残差形を導入します．まず，方程式 (2.1) の「とてもよい」近似解 $\hat{u} \in X$ が手にあると仮定します[†4]．そして，$u_n \in X$ を近似解 $\hat{u}$ とその残差 w_n の和:

$$u_n = \hat{u} + w_n \qquad (2.6)$$

に分解します．式 (2.6) を式 (2.5) に代入して整理すると，近似解 $\hat{u}$ を用いた残差に対する反復式:

$$w_{n+1} = L^{-1}(\ Lw_n - F(\hat{u} + w_n)\ ) \qquad (2.7)$$

が得られます．

2.5　Newton 型不動点方程式

$L = F'[\hat{u}]$ の場合，式 (2.7) の $Lw_n - F(\hat{u} + w_n)$ は $F'[\hat{u}]w_n - F(\hat{u}+w_n)$ となります．ここで，$F(\hat{u} + w_n)$ を形式的に Taylor 展開してみると，

$$F(\hat{u} + w_n) = F(\hat{u}) + F'[\hat{u}]w_n + \cdots \qquad (2.8)$$

ですので，近似解 $\hat{u}$ が $F(\hat{u}) \approx 0$ ならば，$F'[\hat{u}]w_n - F(\hat{u}+w_n)$ は w_n に関する 2 次以上の項に近い，つまり，小さい残差 w_n をより小さな要素に変換する縮小的な性質を持つことが期待されます．

以上の見通しのもと，式 (2.7) の右辺を作用素の形で

$$T(w) := L^{-1}(\ Lw - F(\hat{u} + w)\ ) \qquad (2.9)$$

と定義します．T は X から X への非線形作用素です．

ここまでの変形によって，方程式 (2.1) は，近似解 $\hat{u}$ の残差 $w \in X$ に対する不動点問題:

$$w = T(w) \qquad (2.10)$$

†4　この分野での「とてもよい」近似解とは，結果的に解の存在検証成功に導く近似解のことで，後付けの命名です．

に置き換わります．なぜなら, $u = \hat{u}+w$ が $F(u) = 0$ をみたすならば，式 (2.9) より $T(w) = w$ となり，反対に $w = Tw$ を式 (2.9) に代入し L を作用すれば，$F(\hat{u}+w) = 0$ となるからです．

T は，その由来から Newton 型作用素または擬 Newton 作用素と呼ばれることがあります．

2. 6 ここまでのまとめ

Banach 空間における非線形方程式 (2.1) を精度保証付き数値計算で解く際には,

1) 「とてもよい」近似解
2) 残差引き戻し形
3) Newton 型作用素

を用いた不動点定式化がよく用いられます．

不動点方程式 $w = T(w)$ を満たす $w \in X$ の存在と誤差評価を得ることができれば，手にある近似解 $\hat{u}$ との和:

$$u = \hat{u} + w$$

で，式 (2.1) の解 u の存在検証と誤差評価も導かれます．

3 不動点定理

Banach 空間における不動点定理は，式 (2.10) を満たす不動点 w を求める重要なツールです．解の存在証明を狙う人は，様々な不動点定理の中から，問題や検証の目的にあわせた選択を行います．この章では，ふたつの基本的な定理を紹介します [6].

3. 1 Schauder の不動点定理 (1930)

W を Banach 空間 X の空でない有界凸閉集合$^{(A3)}$ とする．$T : W \to W$ がコンパクト作用素$^{(A4)}$ であるとき，T は W に不動点を持つ．

Schauder の不動点定理は，有限次元の Brouwer の不動点定理を無限次元に拡張したものです．T にコンパクト性を要請するものの，不動点の存在条件はシンプルに,

$$T(W) \subset W \tag{3.1}$$

です．W での不動点の一意性は保証されません．

以降, Schauder の不動点定理の W のように，解を包み込むことが期待される集合を「候補者集合」と呼ぶことにします．

3. 2 Banach の不動点定理 (1922)

W を Banach 空間 X の空でない閉集合とする．作用素 $T : W \to W$ に対し，$0 \le \kappa < 1$ なる κ が存在して，任意の $w_1, w_2 \in W$ で

$$\|T(w_1) - T(w_2)\|_X \le \kappa \|w_1 - w_2\|_X \tag{3.2}$$

を満たすとき，T の不動点が W の中に唯一存在する．

定理では，この後，具体的な（無限の意味での）収束列の作り方の記述があります．ここでは，その部分は省略しています．

条件 (3.2) は，T の Lipschitz 連続性の定義であり，連続性よりも強い条件です．さらに，$\kappa < 1$ となるとき，T は縮小写像と呼ばれます．

Banach の不動点定理では，式 (3.2) の確認のかわりに，T のコンパクト性が必要ありません．候補者集合 W の性質も，やや緩くなっています．また，W での局所一意性が保証されることから，たとえば，分岐問題における拡大方程式の解が孤立解であることを保証する場合などに有効です．

3. 3 候補者集合の作り方

Schauder, Banach の不動点定理とも，作用素 T の縮小性: $T(W) \subset W$ が重要な成立条件です[†5]．この性質を確認するための候補者集合 W の作り方を考えてみます．

残差反復 (2.7) を考える段階で，$F(u) = 0$ の「と

†5 等号の成立でも構いません．ただし，計算機において集合の等号成立を検証するのはとても難しいので，実際の数値計算の段階では，真に含まれることを確認します．

てもよい」近似解 $\hat{u}$ を想定していました．つまり，残差 $w = u - \hat{u}$ は，おのずと微小であるべきです．そこで，0 を中心，$\alpha > 0$ を半径とする X のノルムではかったボール:

$$W = \{\ w \in X \mid \|w\|_X \le \alpha\ \} \tag{3.3}$$

を候補者集合に据えてみます．すると，その作り方から，W は有界凸閉集合であり，$T(W) \subset W$ のための十分条件は，値域 $T(W)$ を X のノルムではかったときに α 以下となる，つまり，

$$\sup_{w \in W} \|T(w)\|_X \le \alpha \tag{3.4}$$

となります．T の定義 (2.9) より，条件 (3.4) は

$$\sup_{w \in W} \|L^{-1}(\ Lw - F(\hat{u} + w)\ )\|_X \le \alpha \tag{3.5}$$

と同じです．

ここで，具体的な値が算定可能な $M > 0$ が存在して，$L^{-1} : Y \to X$ のノルム評価:

$$\|L^{-1}v\|_X \le M\|v\|_Y, \quad \forall v \in Y \tag{3.6}$$

が得られているとします．

数式で書くと簡単そうに見えるかもしれません．しかし，L の可逆性の確認とあわせて，式 (3.6) を満たす，しかも，《具体的に値がわかる》M の算定方法はとても重要な課題です．M の評価方法は次回にまわして，先に進みます．

式 (3.6) を用いると，式 (3.5) の成立のための十分条件は

$$M \sup_{w \in W} \|\ Lw - F(\hat{u} + w)\|_Y \le \alpha \tag{3.7}$$

となります†6．残る評価は $\|\ Lw - F(\hat{u} + w)\|_Y$ です．こちらは，近似解 $\hat{u}$ および線形作用素 L が与えられていますので，$\|w\|_X \le \alpha$ の性質を使って，できるだけ小さな値で，しかも，数学的に厳密な意味で《上から》評価しないといけません．具体的な計算は，与えられた問題依存になります．しかし，2.5 節より，もともと縮小性が期待されている項ですので，M がとんでもなく大きな値でないのを願いつつ，不等式 (3.7) の成立に希望を託します．

†6 ここで，(3.6) の評価を $v \in W$ で行ったり，逆作用素ノルムで括り出すのではなく，L^{-1} の値域を詳しく調べるなど，工夫の余地は残っています．

4 コンパクト作用素の導出

この章では，より具体的な方程式を考え，2 章で説明した無限次元 Newton 法を適用してみます．

4.1 非線形方程式

$X, \hat{X}, Y$ を Banach 空間†7とし，$X, \hat{X}$ に対し，埋め込み^{A5}: $\hat{X} \hookrightarrow X$ がコンパクトとします．また，連続で Fréchet 微分可能かつ X の有界集合を Y の有界集合に移す写像 $f : X \to Y$ と，線形作用素 $A : \hat{X} \to Y$ を定義します．

以上の準備のもと，次の方程式を考えます．

$$Au = f(u). \tag{4.1}$$

式 (4.1) のように，方程式が線形作用素 A とそれ以外の非線形写像 f で記述でき，f の定義域が $\hat{X}$ より広い空間 X に設定できるという性質を利用すると，埋め込み $\hat{X} \hookrightarrow X$ のコンパクト性を用いて，Schauder の不動点定理の適用条件であるコンパクト作用素を生成することができます．

4.2 微分方程式の例

微分方程式の場合，線形作用素 A は，境界条件も含む最高階数の微分作用素が主要項を構成します．

典型的な例は，区分的に滑らかな境界 $\partial\Omega$ を持つ $\mathbb{R}^m (m = 1, 2, 3)$ の有界凸領域 Ω に対する楕円型境界値問題:

$$\left\{ \begin{array}{rcll} -\Delta u &=& f(x, u, \nabla u), & x \in \Omega, \\ u &=& 0, & x \in \partial\Omega, \end{array} \right. \tag{4.2}$$

$$\left\{ \begin{array}{rcccl} \Delta^2 u &=& f(x, u, \nabla u, \Delta u), & & x \in \Omega, \\ u &=& \dfrac{\partial u}{\partial n} &= \quad 0, & x \in \partial\Omega \end{array} \right. \tag{4.3}$$

†7 微分方程式の多くの場合，関数の滑らかさに応じた包含関係: $\hat{X} \subset X \subset Y$ が必要になります．

などです．これらの方程式を幾つか並べたシステムも（ A や f が作成できるならば）対象になります．

4.3 コンパクト作用素による不動点問題

式 (4.1) を移項して，

$$F(u) = Au - f(u) = 0 \tag{4.4}$$

とおけば，方程式 (4.4) に対し，2 章で導入した Newton 型作用素 T が作成可能です．ただし，そのままの道筋ですと，T は $\hat{X}$ の作用素になります．こちらの定式化でも，もちろん構いません．しかし，T のコンパクト性が出てきません．

そこで，式 (4.1) の形を利用します．いま，f の微分可能性を仮定していましたので，2.3 節の線形作用素 L を式 (2.4) にとります．すると，A の線形性を使って，L は

$$L = A - f'[\hat{u}] \tag{4.5}$$

となります．式 (4.5) を T の定義式 (2.9) に代入します．またも A の線形性を使うと，

$$Tw = (A - f'[\hat{u}])^{-1}\underline{(\ f(\hat{u}+w) - f'[\hat{u}]w - A\hat{u}\ )} \tag{4.6}$$

を得ます．これを T の定義とします．

ここで，式 (4.6) の下線部:

$$f(\hat{u}+w) - f'[\hat{u}]w - A\hat{u} \tag{4.7}$$

を眺めます．すると，f と $f'[\hat{u}]$ は X から Y への写像ですので，近似解 $\hat{u}$ が $A\hat{u} \in Y$，つまり $\hat{u} \in \hat{X}$ ならば，w は必ずしも $w \in \hat{X}$ である必要はなく，より広い空間 X で考えても Y に属する，つまり，

$$f(\hat{u}+w) - f'[\hat{u}]w - A\hat{u} \in Y, \quad w \in X$$

であることがわかります．

次に，式 (4.6) の中に現れる逆作用素 $L^{-1} = (A - f'[\hat{u}])^{-1}$ は，Y の要素を $\hat{X}$ に移す連続作用素だとします．いま，$\hat{X} \hookrightarrow X$ ですので，L^{-1} を埋め込みまで含めた作用素:

$$L^{-1} = (A - f'[\hat{u}])^{-1} : Y \to X$$

と見ることができます．より厳密な定義を求める場合には，恒等写像 $I_{\hat{X}\hookrightarrow X}$ と L^{-1} との合成写像:

$$I_{\hat{X}\hookrightarrow X} \circ L^{-1}$$

を改めて L^{-1} とおく，または，L^{-1} の定義は触らずに T の定義を変更することも考えられます．

ここで，埋め込み $\hat{X} \hookrightarrow X$ のコンパクト性と，有界連続写像とコンパクト作用素の合成写像はコンパクトであることを使うと，T は X から X へのコンパクト作用素として定義され，Schauder の不動点定理が適用できます．

もちろん，この定式化では，$\hat{u} \in \hat{X}$ が要請されることと，候補者集合 W は X の部分集合として設定する必要があります．しかし，もし不動点 $w = T(w)$ が見つかったならば，L^{-1} は $\hat{X}$ まで持ち上がった作用素でしたので，結果的に $w \in \hat{X}$ が保証されます．

また，ここまでの変形は f の Fréchet 微分可能性を仮定していました．2 章と同様，$f'[\hat{u}]$ を何らかの線形写像 $\hat{f} : X \to Y$ に置き換えることにより，定式化を拡張することも可能です．

5 おわりに

今回は，Banach 空間における非線形方程式を Newton 型不動点問題に書き直す方法を紹介しました．読まれてきてお判りのように，定式化は「〜を期待して先に進む」の連発になります．この，足元がぼんやりとしか見えない中で「そろそろ」と進む状況は，正直とても不安で，時には検証に失敗してすべてが水泡に帰することもあります．それだけに，未知の解を捕まえた時の喜びは大きいものがあります．

次回は，L^{-1} のノルム評価 (3.6) の方法と，L^{-1} の直接評価を回避する中尾理論について紹介したいと思います．

参 考 文 献

[1] 中尾 充宏, 山本 野人, 精度保証付き数値計算, 日本評論社, 1998.

[2] 増田 久弥, 非線型数学, 朝倉書店, 1985.
[3] 岡本 久, 中村 周, 関数解析 1, 岩波講座 現代数学の基礎 7, 岩波書店, 1997.
[4] 大石 進一, 非線形解析入門, コロナ社, 1997.
[5] 杉原 正顯, 室田 一雄, 数値計算法の数理, 岩波書店, 1994.
[6] Zeidler, Eberhard (Translated by Peter R. Wadsack), Nonlinear Functional Analysis and its Applications, Part I: Fixed-Point Theorems, Springer-Verlag, 1986.

A 付録: 用語集

関数解析で用いられる用語を簡単に説明します.

A1 Banach 空間

線形空間 X から $[0,\infty)$ への写像 $\|\cdot\|_X$ が

- $a\in\mathbb{C}$, $u\in X$ に対し $\|au\|_X=|a|\,\|u\|_X$,
- $u,v\in X$ に対し $\|u+v\|_X \le \|u\|_X+\|v\|_X$,
- $\|u\|_X=0 \Leftrightarrow u=0$

を満たすとき, ノルムであるといいます. ノルムが定義されている線形空間をノルム空間と呼びます.

ノルム空間 X とそのノルム $\|\cdot\|_X$ に対し, X の点列 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ が点 $x^*\in X$ に対し

$$\|x_n-x^*\|_X\to 0 \quad (n\to\infty)$$

となるとき, $\{x_n\}$ は x^* に収束するといいます. また, $\|x_n-x_m\|_X\to 0 \ (n,m\to\infty)$ を満たすとき, $\{x_n\}$ を Cauchy 列（基本列）と呼びます. 任意の Cauchy 列が収束列となるノルム空間を完備であるといいます. Banach 空間とは, 完備なノルム空間のことであり, 長さの概念の入った, 関数解析学が成り立っていくための基盤となる空間です.

A2 Fréchet 微分

Banach 空間 X,Y, 作用素 $f:X\to Y$ に対し, 線形作用素 $L_x:X\to Y$ が存在し,

$$\lim_{v\to 0}\frac{\|f(x+v)-f(x)-L_x v\|_Y}{\|v\|_X}=0$$

が成り立つとき, f は $x\in X$ で Fréchet 微分可能であるといいます. また, L_x を x における f の Fréchet 微分と呼び, (本稿では) $f'[x]$ と表記します.

A3 有界・凸・閉集合

Banach 空間 X の部分集合 U に対し,

- $C\ge 0$ があり, $\forall u\in U$ に対し $\|u\|_X\le C$ となるとき U は有界集合であるといいます.
- 任意の $u,v\in U$, $0\le\lambda\le 1$ に対し
$$\lambda u+(1-\lambda)v\in U$$
をみたすとき U は凸集合であるといいます.
- $u_n\in U,\ u_n\to u(n\to\infty)$ ならば $u\in U$ となるとき U は閉集合であるといいます.

A4 コンパクト作用素

Banach 空間 X,Y の作用素 $T:X\to Y$ が連続であるとは, 任意の $u\in X$ に対し,

$$u_n\to u\ (n\to\infty) \quad ならば \quad T(u_n)\to T(u)\ (n\to\infty)$$

となることをいいます. T が連続であり, かつ, X の任意の有界点列 $\{u_n\}_{n=1}^{\infty}$ に対し, $\{T(u_n)\}_{n=1}^{\infty}$ が収束する部分列を含む時にコンパクトであると呼びます.

コンパクトとは有限次元にもっとも近い無限次元のことだと解釈できます. 実際, 有限次元の「連続性」を無限次元の「コンパクト性」に置き直すことで, 多くの議論を拡張することができるため, 非線形関数解析の中心的な役割を果たす性質です.

コンパクト作用素の例として, 有限次元空間を値域とする連続写像, 積分作用素, 線形微分方程式の解作用素, 滑らかさの高い空間から低い空間への恒等写像, コンパクト作用素と有界連続作用素の合成写像などをあげることができます.

A5 埋め込み

X,Y を $X\subset Y$ となるノルム空間とします. 恒等写像 $I_{X\hookrightarrow Y}:X\to Y$ が連続であるとき, X は Y に埋め込まれているといい,

$$X\hookrightarrow Y$$

と表わします. また, $I_{X\hookrightarrow Y}$ を X の Y への埋め込み作用素, または埋め込みといいます. 特に, $I_{X\hookrightarrow Y}$

がコンパクト作用素であるとき，コンパクトな埋め込みと呼びます．$I_{X \hookrightarrow Y}$ の連続性は，

$$\|u\|_Y \le C\|u\|_X, \quad \forall u \in X$$

となる $C \geq 0$ の存在，すなわち有界性と同値です．この，より狭い空間のノルムで広い空間のノルムを上から評価する定数 C を埋め込み定数と呼びます．特に微分方程式の精度保証では，埋め込み定数の定量的評価がとても重要です．