

有理数演算による非線形方程式の近似解の精度保証 ～有理数演算による精度保証付き広義ニュートン法～

早稲田大学 理工学部 井上 晃 (Akira Inoue)
柏木 雅英 (Masahide Kashiwagi)
大石 進一 (Shin'ichi Oishi)
牧野 光則 (Mitsunori Makino)

1 はじめに

非線形方程式

$$f(x) = 0 \quad (1)$$

の解を求める問題に対して、最もよく用いられるのがニュートン法である。ニュートン法の収束定理には、カントロビッチの定理 [1]、占部の定理 [2] などがある。これらは収束の保証のみならず真解の唯一存在領域をも与えるので、非線形方程式に対する非常に強力な解析手段となり得る。

しかし、浮動小数点方式などの固定有限桁の数値による数値計算で、これらのニュートン法の収束定理の条件成立を確認し、ニュートン法反復により近似解を生成しても、関数の打ち切り誤差、丸め誤差が介在するため、その精度は保証されていない。また、固定有限桁の数値であるので、任意精度の近似解を求めるという要求には当然応えられない。

著者らは、厳密に丸め誤差、打ち切り誤差を把握し、任意精度の近似解を得るという立場から、計算機で扱える数値を分母分子を任意桁の整数としてもつ有理数として精度保証付き数値計算の研究を行ってきた [4]。有理数演算の長所は主に次の 2 つが挙げられる：

- 四則演算に閉じている。すなわち、ある意味で、完全精度の (情報落ちのない) 演算が行える。
- 有理数の連分数展開 [5] を利用して、丸め誤差を指定したより桁の短い有理数への丸めが行える。

本稿では、有限次元非線形方程式

$$f(x) = 0, \quad f: U \subset \mathbf{R}^m \rightarrow \mathbf{R}^m, \quad (2)$$

の近似解が何らかの方法により求められたとき、

- それがどの程度 (何桁まで) 正しいのか、精度の保証を与える.
- 近似解の精度を任意に高める.

という問題に対して、まず、関数 f の打ち切り誤差を考慮した上で、真解の存在を厳密に検証することにより近似解の精度保証が行えることを示す。さらに、有理数の適当な丸めを考慮して近似解の精度を任意に高める精度保証付き広義ニュートン法反復を提案する。

2 広義ニュートン法の収束条件

本節では準備として広義ニュートン法の収束条件を示す。広義ニュートン法の収束を保証する占部の定理は縮小写像原理を適用することにより証明される [3]。以下に示す定理 1 は占部の定理を縮小写像原理により近い形にしたものである。

定理 1 X, Y を Banach 空間, $U \subset X$ を非空な開集合, $f: U \rightarrow Y$ を C^1 級とする。 $f(x) = 0$ の近似解 $x_0 \in U$ と, 有界線形作用素 $L: Y \rightarrow X (f'(x_0)^{-1}$ の近似) が与えられ, ある $\delta > 0$ が存在して, 次の条件 (A)~(D) が満たされているとする:

(A) $B(x_0; \delta) \subset U$. 但し, $B(x_0; \delta) = \{x \in X \mid \|x - x_0\| \leq \delta\}$.

(B) E を恒等作用素とすると, ある $K_0 > 0$ が存在して,

$$\|E - Lf'(x)\| \leq K_0, \quad \forall x \in B(x_0; \delta). \quad (3)$$

(C)

$$\|Lf(x_0)\| + K_0\delta \leq \delta. \quad (4)$$

(D)

$$K_0 < 1. \quad (5)$$

このとき以下の (a)~(e) が成立する:

(a) $f(x) = 0$ の解 x^* は $B(x_0; \delta)$ に唯一存在.

更に,

$$x_{k+1} = x_k - Lf(x_k). \quad (k \geq 0) \quad (6)$$

で定義される点列 $\{x_k\}$ に対して,

(b)

$$x_k \in B(x_0; \delta). \quad (k \geq 0) \quad (7)$$

(c)

$$x_k \rightarrow x^*. \quad (k \rightarrow \infty) \quad (8)$$

(d)

$$\|x_k - x^*\| \leq \frac{\|Lf(x_k)\|}{1 - K_0}. \quad (k \geq 0) \quad (9)$$

(e)

$$\|x_k - x^*\| \leq \frac{K_0^k}{1 - K_0} \|Lf(x_0)\|. \quad (k \geq 0) \quad (10)$$

□

定理 1 の条件 (C) は,

$$g(x) = x - Lf(x), \quad (11)$$

により定義される $g : B(x_0; \delta) \rightarrow X$ が, 自分自身への写像となるための条件, また, 条件 (D) は g が縮小写像, すなわち, 任意の $z_1, z_2 \in B(x_0; \delta)$ に対して,

$$\|g(z_1) - g(z_2)\| \leq K_0 \|z_1 - z_2\|, \quad (K_0 < 1) \quad (12)$$

となるための条件である.

数値誤差の入らない無限精度の数値計算が行えるならば, 反復 (6) により生成される点列 $\{x_k\}$ は, 真解 x^* へ一次収束する. しかし, 浮動小数点方式などの固定有限桁の数値による数値計算で, 定理 1 の条件成立を確かめ, 反復 (6) により近似解を生成しても, その精度に保証はない. また, 固定有限桁の数値であるので, 任意精度の近似解を求めるという要求にも当然応えられない.

次節以降では、計算機で扱える数値を有理数として、非線形方程式 (2) の近似解に対する真解の存在の厳密な検証条件、さらに、近似解の精度を任意に高める精度保証付き広義ニュートン法反復とその収束性を示す。

3 有理数演算による真解の存在の検証

以下では、有理数を要素とする m 次元ベクトル x のノルム、線形作用素 $A = [a_{ij}] (m \times m$ 行列) の作用素ノルムを以下のように定義する。

$$\|x\| = \max_{1 \leq i \leq m} |x_i|, \quad (13)$$

$$\|A\| = \max_{1 \leq i \leq m} \sum_{j=1}^m |a_{ij}|. \quad (14)$$

$f: U \subset \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ は次の仮定 1 を満たすものとする。但し、 Q は有理数の集合である。

仮定 1 実数値関数 f の値を計算する近似関数の列 $\{f_N: U \cap Q^m \rightarrow Q^m\} (N = 1, 2, \dots)$ が存在し、

$$\|f_N(x) - f(x)\| \leq \varepsilon_N, \quad \forall x \in U \cap Q^m \quad (15)$$

と誤差 $\varepsilon_N > 0$ が有理数として評価でき、

$$\varepsilon_N \rightarrow 0. \quad (N \rightarrow \infty) \quad (16)$$

□

まず、何らかの方法により方程式 $f(x) = 0$ の近似解 $x_0 \in U \cap Q^m$ が得られたとき、定理 2 の条件の成立を有理数演算で確かめることにより真解 $x^* \in U$ の存在が厳密に検証される：

定理 2 (有理数演算による真解の存在の検証 1) $U \subset \mathbb{R}^m$, $f: U \rightarrow \mathbb{R}^m$ を仮定 1 を満たす C^1 級関数とする。 $f(x) = 0$ の近似解 $x_0 \in U \cap Q^m$ と、要素が全て有理数の $m \times m$ 行列 $L(f'(x_0)^{-1}$ の近似) が与えられ、適当な f の近似関数 f_{N_0} に対して、ある $\delta > 0$ が存在して、次の条件 (A') ~ (C') が満たされているとする：

$$(A') \quad B(x_0; \delta) \subset U \quad (B(x_0; \delta) = \{x \in \mathbb{R}^m \mid \|x - x_0\| \leq \delta\}).$$

(B') E を $m \times m$ 単位行列とするとき、

$$\|E - Lf'(x)\| \leq K_0, \quad \forall x \in B(x_0; \delta) \quad (17)$$

なる有理数 $K_0 > 0$ が評価できる。

(C') $0 < c \leq 1$ なる定数 $c \in Q$ について

$$\|L\| (\|f_{N_0}(x_0)\| + \varepsilon_{N_0}) + K_0\delta \leq c\delta \quad (18)$$

このとき, $B(x_0; \delta)$ に $f(x) = 0$ の真解 x^* が唯一存在する. \square

(証明)

仮定 1 より

$$\|f(x_0)\| \leq \|f_{N_0}(x_0)\| + \varepsilon_{N_0}. \quad (19)$$

式 (18), (19) より

$$\|Lf(x_0)\| + K_0\delta \leq c\delta. \quad (20)$$

また, 式 (18) より

$$K_0 < c. \quad (21)$$

よって, $0 < c \leq 1$ であるから, 式 (18) の成立により, 定理 1 の条件 (C), (D) の成立が確かめられる. \square

真解の存在を検証するだけならば, 定理 2 の条件 (C') において $c = 1$ で十分である. 真解の存在を検証した後, 次節に示す広義ニュートン法により近似解の精度をさらに高めるために, この定数 c が 1 より小さいことが必要となる.

4 単体近似を用いた導関数の近似

有理数演算により定理 2 を用いて真解の存在を検証し, 近似解の精度保証を行う上で重要となるのは, $f(x) = 0$ の近似解 $x_0 \in U \cap Q^m$ が与えられたときに, $f'(x_0)^{-1}$ の近似として

$$\|E - Lf'(x)\| \leq K_0, \quad \forall x \in B(x_0; \delta) \quad (22)$$

なる要素がすべて有理数の $m \times m$ 行列 L が構成できる事, その際 $K_0 > 0$ が有理数として評価できる事, 定理 2 の条件 (A') ~ (C') を満たす $\delta > 0$ を得る事である. 本節では, 導関数 $f'(x)$ の α -リプシッツ連続性を仮定し, x_0 を重心とする単体を構成して f を区分的線形近似し, その線形成分を用いて L を構成し, K_0 を評価するアルゴリズムを示す.

仮定 2 $f(x)$ のフレッシュ導関数 $f'(x)$ は α -リプシッツ連続, すなわち

$$\|f'(x_1) - f'(x_2)\| \leq \alpha \|x_1 - x_2\|, \quad \forall x_1, x_2 \in U \quad (23)$$

であり、リップシッツ定数 $\alpha > 0$ が有理数として評価できる。 □

アルゴリズム 1 (単体近似を用いた L の構成)

$f(x) = 0$ の近似解 $x_0 \in U \cap Q^m$ が与えられたとき、

Step 1: x_0 を重心とする刻み幅 $\rho \in Q$ の単体 $\sigma = \text{co}\{v^0, \dots, v^m\}$ を構成する ($\text{co}\{v^0, \dots, v^m\}$ は $m+1$ 個の頂点ベクトル $v^0, \dots, v^m (v^i \in Q^m)$ の凸包)。

Step 2: 単体 σ において、適当な近似関数 f_{N_0} を用いた単体近似の線形成分 $A_{\rho, N_0}(\sigma)$ を有理数演算により求める。

Step 3: $A_{\rho, N_0}(\sigma)$ の各要素を誤差 η 以内の有理数に丸め、その行列を \tilde{A} とする。

Step 4: 有理数演算により \tilde{A} の逆行列を求め、 L とする。 □

アルゴリズム 1 の Step 1 において、頂点ベクトル v^0, \dots, v^m は次のようにして求められる [6]:

$$v^0[j] = x_0[j] - \rho \frac{m+1-j}{m+1}, \quad (j = 1, \dots, m)$$

($v^0[j], x_0[j]$ は v^0, x_0 の第 j 成分)

(24)

$$v^{i+1} = v^i + \rho e^i. \quad (i = 0, \dots, m-1)$$

$$e^i[j] = \begin{cases} 1, & (j = i+1) \\ 0, & (j \neq i+1) \end{cases}$$
(25)

仮定 1 のもと、重心座標 $\lambda = (\lambda_0, \dots, \lambda_m)$ をもつ $x \in \sigma$ 、すなわち、

$$x = \sum_{i=0}^m \lambda_i v^i, \quad \sum_{i=0}^m \lambda_i = 1, \quad \lambda_i \geq 0, \quad i = 0, \dots, m$$
(26)

なる x に対して、 f_{N_0} を用いた f の単体近似 [6],

$$F_{\rho, N_0}(x) = \sum_{i=0}^m \lambda_i f_{N_0}(v^i),$$
(27)

が定義される。 $F_{\rho, N_0} : U \rightarrow R^m$ は単体 σ において線形であるので、要素がすべて有理数である $m \times m$ 行列 $A_{\rho, N_0}(\sigma)$ 、 m 次元ベクトル $b_{\rho, N_0}(\sigma)$ を用いて、

$$F_{\rho, N_0}(x) = A_{\rho, N_0}(\sigma)x + b_{\rho, N_0}(\sigma), \quad x \in \sigma$$
(28)

と書ける. $m \times m$ 行列 $A_{\rho, N_0}(\sigma)$ は, $x \in \sigma$ における $f'(x_0)$ の近似となり, 次のようにして計算される:

$$A_{\rho, N_0}(\sigma) = \frac{1}{\rho} \left[f_{N_0}(v^1) - f_{N_0}(v^0), \dots, f_{N_0}(v^m) - f_{N_0}(v^{m-1}) \right]. \quad (29)$$

$f'(x_0)$ に対する $A_{\rho, N_0}(\sigma)$ の精度に関して, 作用素ノルムの定義 (14) より直ちに補題 1 が成立する.

補題 1 [6] 仮定 1, 2 のもと,

$$\|A_{\rho, N_0}(\sigma) - f'(x_0)\| \leq \frac{2(m+1)^2 \varepsilon_{N_0} + \alpha m^2 \rho^2}{(m+1)\rho}. \quad (30)$$

□

以下では, 簡単のため,

$$\beta = \frac{2(m+1)^2 \varepsilon_{N_0} + \alpha m^2 \rho^2}{(m+1)\rho}, \quad (31)$$

とする.

注意 1 適当な ε_{N_0} が与えられているとき, 式 (31) で定められる β を最小にするような単体の刻み幅 ρ_{N_0} は,

$$\rho_{N_0} = \frac{m+1}{m} \sqrt{\frac{2\varepsilon_{N_0}}{\alpha}}. \quad (32)$$

さらに, このときの β_{N_0} は

$$\beta_{N_0} = 2m \sqrt{2\alpha \varepsilon_{N_0}}, \quad (33)$$

により与えられる (実際には, ρ_{N_0}, β_{N_0} の値は有理数として近似的に計算される). □

アルゴリズム 1 の Step 3 において, $A_{\rho, N_0}(\sigma)$ の各要素を誤差 η 以内の有理数に丸めることにより生成される行列 \tilde{A} について, 次の補題 2 が成立する.

補題 2

$$\|A_{\rho, N_0}(\sigma) - \tilde{A}\| \leq m\eta. \quad (34)$$

□

定理 2 における $f'(x_0)^{-1}$ の近似 L として, \tilde{A} の逆行列を用いたとき, 定理 2 の条件の成立は次の定理 3 により確かめられる.

定理 3 (有理数演算による真解の存在の検証 2) 仮定 1, 2のもと, $f(x) = 0$ の近似解 $x_0 \in U \cap Q^m$ に対して, 適当な近似関数 f_{N_0} を用いて, アルゴリズム 1 により $m \times m$ 行列 L を構成するとき,

$$B(x_0; \delta) \subset U, \quad (35)$$

$$\|L\| (\|f_{N_0}(x_0)\| + \varepsilon_{N_0} + \alpha\delta^2 + (\beta + m\eta)\delta) < c\delta, \quad (36)$$

を満たすような $\delta > 0$ が存在すれば, $B(x_0; \delta)$ に $f(x) = 0$ の真解 $x^* \in U$ が唯一存在する. \square

(証明) 定理 2 において, L をアルゴリズム 1 により構成される行列とすると,

$$\begin{aligned} \|E - Lf'(x)\| &= \|L(\tilde{A} - f'(x))\| \\ &\leq \|L\| (\|\tilde{A} - A_{\rho, N_0}(\sigma)\| + \|A_{\rho, N_0}(\sigma) - f'(x_0)\| + \|f'(x_0) - f'(x)\|) \\ &\leq \|L\| (m\eta + \beta + \alpha\|x_0 - x\|). \end{aligned} \quad (37)$$

式 (37) より, $x \in B(x_0; \delta)$ であれば, $K_0 = \|L\|(\alpha\delta + \beta + m\eta)$, と評価でき, 式 (36) を満たすような $\delta > 0$ が存在すれば, 定理 2 の条件 (B'), (C') の成立が確かめられる. \square

注意 2 定理 3 における式 (36) を満たすような $\delta > 0$ の存在は,

$$(\beta + m\eta)\|L\| < c, \quad (38)$$

$$\frac{4\alpha\|L\|^2(\|f_{N_0}(x_0)\| + \varepsilon_{N_0})}{(c - (\beta + m\eta)\|L\|)^2} < 1, \quad (39)$$

の成立により確かめられる. 式 (38), (39) が成立していれば, $\delta > 0$ は

$$\bar{\delta} - d < \delta < \bar{\delta} + d \quad (40)$$

の範囲から選べる. ここで

$$\bar{\delta} = \frac{1}{2\alpha} \left(\frac{c}{\|L\|} - \beta - m\eta \right), \quad (41)$$

$$d = \sqrt{\bar{\delta}^2 - \frac{\|f_{N_0}(x_0)\| + \varepsilon_{N_0}}{\alpha}}. \quad (42)$$

ただし, 式 (42) における d の値は, 真の値よりも小さい有理数として, 近似的に計算される. \square

5 関数の打ち切り誤差, 適当な有理数の丸めを考慮した精度保証付き広義ニュートン法

本節では, 定理 2 が成立, すなわち, $f(x) = 0$ の近似解 $x_0 \in U \cap Q^m$ の近傍に真解 $x^* \in U$ の存在が検証されたあとに, x_0 を初期点とし, 関数 f の打ち切り誤差, 有理数の適当な丸めを考慮して近似解の精度を任意に高める精度保証付き広義ニュートン法反復を示す.

まず, $f(x) = 0$ の近似解 $x_0 \in U \cap Q^m$, 要素がすべて有理数の適当な $m \times m$ 行列 L , $0 < c < 1$ なる定数 $c \in Q$ について, 定理 2 の条件 (A') ~ (C') を満たすような $\delta_0 > 0$, $K_0 > 0$ を有理数として求め, $0 < \kappa < 1 - c$ なる定数 $\kappa \in Q$ を定める.

真解 x^* との誤差評価が $\delta_{k-1} \in Q$ で与えられている $x_{k-1} \in U \cap Q^m$ から $x_k \in U \cap Q^m$ を生成し, その誤差評価 $\delta_k \in Q$ を与える k 回目の反復 $G_k : U \cap Q^m \rightarrow Q^m$, すなわち

$$x_k = G_k(x_{k-1}), \quad (k \geq 1) \quad (43)$$

は次のようになる:

アルゴリズム 2 (精度保証付き広義ニュートン法反復)

$$\|x_{k-1} - x^*\| \leq \delta_{k-1} \quad (44)$$

なる $x_{k-1} \in U \cap Q^m$ が得られている.

Step 1:

$$\|L\| \varepsilon_{N_k} + r_k + \Delta_k \leq \kappa \delta_{k-1} \quad (45)$$

を満たすように, f の近似関数 f_{N_k} , 丸めの大きさの上限 $r_k \in Q$, $\Delta_k \in Q$ を定める.

Step 2: $f_{N_k}(x_{k-1})$ の値を用いて

$$g_{N_k}(x_{k-1}) = x_{k-1} - L f_{N_k}(x_{k-1}) \quad (46)$$

を有理数演算により誤差なしで計算.

Step 3: $g_{N_k}(x_{k-1}) \in Q^m$ の各成分を誤差 r_k 以内の有理数に丸め, x_k とする.

Step 4: $(K_0 + \kappa)\delta_{k-1}$ を誤差 Δ_k 以内に下方へ丸め, δ_k とする. □

アルゴリズム 2により生成される点列 $\{x_k\}$ が真解 x^* に収束するためには,

- アルゴリズム 2により生成される点列 $\{x_k\}$ が x_0 の δ_0 近傍 (真解 x^* の唯一存在する領域) に存在する.
- x_k と真解 x^* の誤差 δ_k が毎回の反復により縮小する.

の 2 点が必要とされる. アルゴリズム 2 の収束性に関して, 次の定理 4 が成立する.

定理 4 (精度保証付き広義ニュートン法反復の収束性) 定理 2 が成立するような x_0 , すなわち, δ_0 近傍に真解 x^* が唯一存在するような x_0 を初期点としてアルゴリズム 2 により生成される点列 $\{x_k\} (k \geq 1)$ は

$$x_k \in B(x_0; \delta_0) \cap Q^m, \quad (47)$$

$$\|x_k - x^*\| \leq \delta_k \leq (K_0 + \kappa)\delta_{k-1}, \quad (48)$$

$$(K_0 + \kappa < 1)$$

を満たす. □

(証明)

式 (47), (48) の成立を, 数学的帰納法により証明, すなわち, 任意の $k \geq 1$ について

$$\|x_k - x_0\| \leq \delta_0, \quad (49)$$

$$\|x_k - x^*\| \leq \delta_k \leq (K_0 + \kappa)\delta_{k-1}, \quad (50)$$

が成立することを示す.

(i) $k = 1$ のとき

$$\begin{aligned} \|x_1 - x_0\| &= \|G_1(x_0) - x_0\| \\ &\leq \|G_1(x_0) - g_{N_1}(x_0)\| + \|g_{N_1}(x_0) - g(x_0)\| + \|g(x_0) - x_0\|. \end{aligned} \quad (51)$$

第 1 項はアルゴリズム 2 の Step 3 における丸めの大きさにより評価される.

$$\|G_1(x_0) - g_{N_1}(x_0)\| \leq r_1. \quad (52)$$

第2項について,

$$\begin{aligned}
\|g_{N_1}(x_0) - g(x_0)\| &= \|x_0 - Lf_{N_1}(x_0) - (x_0 - Lf(x_0))\| \\
&\leq \|L\| \|f_{N_1}(x_0) - f(x_0)\| \\
&\leq \|L\| \varepsilon_{N_1}. \quad (\because \text{仮定 1 より})
\end{aligned} \tag{53}$$

第3項について, 式(20)より,

$$\|g(x_0) - x_0\| \leq (c - K_0)\delta_0. \tag{54}$$

よって,

$$\begin{aligned}
\|x_1 - x_0\| &\leq \kappa\delta_0 + (c - K_0)\delta_0 \\
&= (\kappa + c - K_0)\delta_0 \\
&< \delta_0. \quad (\because \kappa + c - K_0 < 1)
\end{aligned} \tag{55}$$

したがって, $k = 1$ のとき, 式(49)は成立. また,

$$\begin{aligned}
\|x_1 - x^*\| + \Delta_1 &= \|G_1(x_0) - x^*\| + \Delta_1 \\
&\leq \|G_1(x_0) - g_{N_1}(x_0)\| + \|g_{N_1}(x_0) - g(x_0)\| + \Delta_1 + \|g(x_0) - x^*\|.
\end{aligned} \tag{56}$$

第1項, 第2項, 第3項について, 式(45), (52), (53)より,

$$\|G_1(x_0) - g_{N_1}(x_0)\| + \|g_{N_1}(x_0) - g(x_0)\| + \Delta_1 \leq \kappa\delta_0. \tag{57}$$

第4項について, $x_1 \in B(x_0; \delta_0)$ であるから,

$$\begin{aligned}
\|g(x_0) - x^*\| &\leq K_0 \|x_0 - x^*\| \\
&\leq K_0 \delta_0.
\end{aligned} \tag{58}$$

よって,

$$\|x_1 - x^*\| + \Delta_1 \leq (K_0 + \kappa)\delta_0. \tag{59}$$

$(K_0 + \kappa)\delta_0$ を誤差 Δ_1 以内に下方に丸め, δ_1 とすれば,

$$\|x_1 - x^*\| \leq \delta_1 \leq (K_0 + \kappa)\delta_0. \tag{60}$$

したがって, $k = 1$ のとき, 式 (50) は成立.

(ii) $k = l$ のとき

$$\|x_l - x_0\| \leq \delta_0, \quad (61)$$

$$\|x_l - x^*\| \leq \delta_l \leq (K_0 + \kappa)\delta_{l-1}, \quad (62)$$

が成立すると仮定.

$k = l + 1$ のときについて

$$\begin{aligned} \|x_{l+1} - x_0\| &= \|G_{l+1}(x_l) - x_0\| \\ &\leq \|G_{l+1}(x_l) - g_{N_{l+1}}(x_l)\| + \|g_{N_{l+1}}(x_l) - g(x_l)\| \\ &\quad + \|g(x_l) - g(x_0)\| + \|g(x_0) - x_0\| \end{aligned} \quad (63)$$

第 1 項はアルゴリズム 2 の Step 3 における丸めの大きさにより評価される.

$$\|G_{l+1}(x_l) - g_{N_{l+1}}(x_l)\| \leq r_{l+1}. \quad (64)$$

第 2 項について,

$$\begin{aligned} \|g_{N_{l+1}}(x_l) - g(x_l)\| &= \|x_l - Lf_{N_{l+1}}(x_l) - (x_l - Lf(x_l))\| \\ &\leq \|L\| \|f_{N_{l+1}}(x_l) - f(x_l)\| \\ &\leq \|L\| \varepsilon_{N_{l+1}}. \quad (\because \text{仮定 1 より}) \end{aligned} \quad (65)$$

第 3 項について, $x_l \in B(x_0; \delta)$ であるから式 (12) により

$$\begin{aligned} \|g(x_l) - g(x_0)\| &\leq K_0 \|x_l - x_0\| \\ &\leq K_0 \delta_0. \end{aligned} \quad (66)$$

第 4 項について,

$$\|g(x_0) - x_0\| \leq (c - K_0)\delta_0. \quad (67)$$

よって,

$$\begin{aligned} \|x_{l+1} - x_0\| &\leq \kappa\delta_l + K_0\delta_0 + (c - K_0)\delta_0 \\ &\leq \kappa\delta_l + c\delta_0 \\ &< \kappa\delta_0 + c\delta_0 \quad (\because \delta_l < \delta_0) \\ &< \delta_0. \quad (\because c + \kappa < 1) \end{aligned} \quad (68)$$

したがって, $k = l + 1$ のとき, 式 (49) は成立. また,

$$\begin{aligned} \|x_{l+1} - x^*\| + \Delta_{l+1} &= \|G_{l+1}(x_l) - x^*\| + \Delta_{l+1} \\ &\leq \|G_{l+1}(x_l) - g_{N_{l+1}}(x_l)\| + \|g_{N_{l+1}}(x_l) - g(x_l)\| \\ &\quad + \Delta_{l+1} + \|g(x_l) - x^*\|. \end{aligned} \quad (69)$$

第1項, 第2項, 第3項について, 式 (45), (64), (65) より,

$$\|G_{l+1}(x_l) - g_{N_{l+1}}(x_l)\| + \|g_{N_{l+1}}(x_l) - g(x_l)\| + \Delta_{l+1} \leq \kappa \delta_l. \quad (70)$$

第4項について, $x_l \in B(x_0; \delta_0)$ であるから,

$$\begin{aligned} \|g(x_l) - x^*\| &\leq K_0 \|x_l - x^*\| \\ &\leq K_0 \delta_l. \end{aligned} \quad (71)$$

よって,

$$\|x_{l+1} - x^*\| + \Delta_{l+1} \leq (K_0 + \kappa) \delta_l. \quad (72)$$

$(K_0 + \kappa) \delta_l$ を誤差 Δ_{l+1} 以内に下方へ丸め, δ_{l+1} とすれば,

$$\|x_{l+1} - x^*\| \leq \delta_{l+1} \leq (K_0 + \kappa) \delta_l. \quad (73)$$

したがって, $k = l + 1$ のとき, 式 (50) は成立.

以上 (i)(ii) より, 任意の $k \geq 1$ について式 (49), (50) は成立. \square

誤差を考慮しない広義ニュートン法反復 (6) では, 1回の反復ごとに真解との誤差が K_0 倍縮小する. 本節で示したアルゴリズム 2により生成される点列 $\{x_k\} \subset U \cap Q^m$ の真解 $x^* \in U$ に対する誤差評価の列 $\{\delta_k\} \in Q$ は, 式 (48) より毎回 $K_0 + \kappa$ 倍以下の割合で小さくなっていることがわかる.

また, 定理 2 の条件 (C') は定理 1 の条件 (C) より厳しくなっている (右辺の δ の係数が $0 < c \leq 1$ なる定数 c となっている). これは, 写像 G_k に関数 f の打ち切り誤差と有理数の丸めの誤差が含まれるために, アルゴリズム 2により生成される点列 $\{x_k\}$ を x_0 の δ_0 近傍 (真解の唯一存在する領域) から出ないようにするために必要となった.

本節で示した誤差を考慮した精度保証付き広義ニュートン法反復により, 非線形方程式 (2) の任意精度の近似解が有理数として得られる.

6 数値実験例

本節では、3~5節で示したアルゴリズムをある非線形方程式に対して数値実験を行った結果を示す。そのため、著者らは分母分子を任意長の整数として持つ有理数を数値型とする有理数演算ライブラリーを作成した。この中には、

- 有理数の四則演算.
- 有理数を要素とするベクトル, 行列の演算, 及び, それらのノルムの評価.
- ガウスの消去法による連立1次方程式, 逆行列の exact な計算.
- 連分数展開を用いた丸め誤差指定の有理数の丸め関数.
- 有理数の平方根を任意精度の有理数として近似する関数.

などが含まれている。

例 1 例 1では、以下に示す非線形写像 $f: R^m \rightarrow R^m$ の不動点を求める問題を考える:

$$f(x) = (f_1(x), \dots, f_m(x)), \quad x \in R^m, \quad (74)$$

$$f_k(x) = \left(\sum_{i=1}^m x_i^3 + \sqrt{mk} \right) / 2m \quad (1 \leq k \leq m).$$

□

\sqrt{mk} の値は連分数展開を用いて任意精度の有理数として計算できるので、 f は仮定 1 を満たしているといえる。

$m = 5$ のとき, 単精度, 及び倍精度浮動小数点演算によるニュートン法反復で得られた近似解を表 1 に示す。まず, この近似解がどの程度の精度をもっているのか, それぞれ有理数演算により定理 3 の条件成立を確認することにより検証する。

表 1: 浮動小数点演算によるニュートン法反復で得られた近似解 ($m = 5$)

	単精度	倍精度
$x_0[1]$	0.26562473177909851	0.26562473538180886
$x_0[2]$	0.35824570059776306	0.35824570364866781
$x_0[3]$	0.42931628227233887	0.42931627225257157
$x_0[4]$	0.48923152685165405	0.48923153313178785
$x_0[5]$	0.54201793670654297	0.54201793763182993

(i) 単精度浮動小数点演算で得られた近似解の場合

$\alpha = 3$, $\varepsilon_{N_0} = 1.0 \times 10^{-8}$, $\rho_{N_0} = 3149/38567216$ ((32)により計算), $\eta = 1.0 \times 10^{-4}$ としてアルゴリズム 1により L を構成する. $c = 1/10$ としたとき,

$$(38) \text{ の左辺} \approx 4.07 \times 10^{-3} < c$$

$$(39) \text{ の左辺} \approx 5.01 \times 10^{-5} < 1$$

であり, 定理 3 の条件成立が確かめられる. このとき, $\delta_0 = 1/3445144 \approx 2.9 \times 10^{-7}$ と計算でき, x_0 の δ_0 近傍に $f(x)$ の不動点 $x^* \in R^5$ が存在することが検証された. すなわち, 表 1 の単精度浮動小数点演算により得られた近似解に定理 3 により保証された精度は小数点以下 6 桁である.

(ii) 倍精度浮動小数点演算で得られた近似解の場合

$\alpha = 3$, $\varepsilon_{N_0} = 1.0 \times 10^{-11}$, $\rho_{N_0} = 777/300930806$ ((32)により計算), $\eta = 1.0 \times 10^{-4}$ としてアルゴリズム 1により L を構成する. $c = 1/10$ としたとき,

$$(38) \text{ の左辺} \approx 7.96 \times 10^{-4} < c$$

$$(39) \text{ の左辺} \approx 2.32 \times 10^{-8} < 1$$

であり, 定理 3 の条件成立が確かめられる. このとき, $\delta_0 = 1/2081529083 \approx 4.80 \times 10^{-10}$ と計算でき, x_0 の δ_0 近傍に $f(x)$ の不動点 $x^* \in R^5$ が存在することが検証された. すなわち,

表1の倍精度浮動小数点演算により得られた近似解に定理3により保証された精度は小数点以下8桁である。

次に、表1の単精度浮動小数点演算により得られた近似解を初期点として、第5節で提案した精度保証付き広義ニュートン法により近似解の精度を高める。このとき、 $K_0 \approx 4.07 \times 10^{-3}$ と評価でき、 $\kappa = 1/100$ と定め、表1の単精度の近似解を初期点 $x_0 \in \mathbb{Q}^5$ として、アルゴリズム2により生成した点列 $\{x_k\}$ 、及び真解 x^* との誤差評価 $\{\delta_k\}$ を表2に示す。なお、アルゴリズム2のStep1における $\kappa\delta_{k-1}$ の配分は、 $\|L\|_{\varepsilon_{N_k}} : r_k : \Delta_k = 9 : 9 : 2$ とした。近似解の精度は毎回の反復で $K_0 + \kappa \approx 1.407 \times 10^{-2}$ 倍ずつ向上している。毎回の反復で適当な有理数の丸めを行っているため、得られる近似解と誤差評価の有理数の桁の長さは毎回の反復で1, 2桁増える程度にとどまっている。

表 2: 精度保証付き広義ニュートン法反復 ($m = 5$)

k	x_k					δ_k
1	$\frac{15670}{58993}$	$\frac{43505}{121439}$	$\frac{18856}{43921}$	$\frac{21671}{44296}$	$\frac{50341}{92877}$	$\frac{1}{244880310}$
2	$\frac{94105}{354278}$	$\frac{144483}{403307}$	$\frac{139238}{324325}$	$\frac{407910}{833777}$	$\frac{175197}{323231}$	$\frac{4}{69624220237}$
3	$\frac{831275}{3129509}$	$\frac{729399}{2036030}$	$\frac{1275621}{2971285}$	$\frac{21564053}{44077398}$	$\frac{17576149}{32427246}$	$\frac{1}{1237219736961}$
4	$\frac{24624561}{92704322}$	$\frac{22994329}{64185917}$	$\frac{23698703}{55201036}$	$\frac{21564053}{44077398}$	$\frac{17576149}{32427246}$	$\frac{1}{87941390068862}$
5	$\frac{74704958}{281242475}$	$\frac{51238934}{143027351}$	$\frac{72371730}{168574393}$	$\frac{647329500}{1323155717}$	$\frac{88293567}{162897869}$	$\frac{2}{12501721167559291}$
6	$\frac{372693515}{1403082866}$	$\frac{2117810948}{5911615761}$	$\frac{1904088062}{4435163969}$	$\frac{668893553}{1367233115}$	$\frac{4042689467}{7458589811}$	$\frac{1}{444310216238950966}$
7	$\frac{3975674585}{14967260407}$	$\frac{6432916383}{17956716068}$	$\frac{4266105207}{9936975332}$	$\frac{5372712477}{10981942318}$	$\frac{16453214718}{30355480097}$	$\frac{2}{63163004712204438039}$
8	$\frac{554879552966}{2088960398091}$	$\frac{34282392863}{95695196101}$	$\frac{1227168441934}{2858425178005}$	$\frac{119515897547}{244293119828}$	$\frac{53402333621}{98525030102}$	$\frac{1}{2244808367251431561281}$
9	$\frac{554879552966}{2088960398091}$	$\frac{419939441687}{1172210685041}$	$\frac{1250403056031}{2912545218634}$	$\frac{381376329655}{779541594986}$	$\frac{1536539606608}{2834850103525}$	$\frac{6}{957363816742245148865389}$
10	$\frac{1679895299727}{6324318016966}$	$\frac{2485354257259}{6937568914145}$	$\frac{108808300488794}{253445554061787}$	$\frac{3694247399003}{7551122830032}$	$\frac{7859358248621}{14500181088028}$	$\frac{85}{96403138129197772299900846}$

表 3: 精度保証付き広義ニュートン法反復 ($m = 5$, 第 1 成分のみ小数点以下 30 桁表示)

k	x_k の第 1 成分	δ_k
1	<u>0.265624735138067228315223840116</u>	4.1×10^{-9}
2	<u>0.265624735377302570297901647858</u>	5.7×10^{-11}
3	<u>0.265624735381812290682020725934</u>	8.1×10^{-13}
4	<u>0.265624735381808843820679687404</u>	1.1×10^{-14}
5	<u>0.265624735381808882175425315824</u>	1.6×10^{-16}
6	<u>0.265624735381808874572914925753</u>	2.2×10^{-18}
7	<u>0.265624735381808874811006687391</u>	3.1×10^{-20}
8	<u>0.265624735381808874808671883875</u>	4.4×10^{-22}
9	<u>0.265624735381808874808671883875</u>	6.3×10^{-24}
10	<u>0.265624735381808874808671959568</u>	8.8×10^{-26}

注) 下線部が精度の保証されている桁

さらに、近似解の精度が毎回の反復で向上していく様子を、表 3 に x_k の第 1 成分を小数点以下 30 桁まで表示することにより示す。下線部が精度の保証されている桁である。表 2, 3 より反復 10 回で小数点以下 23 桁の精度が分母分子がそれぞれ 13 桁の有理数により得られていることがわかる。

表 4, 5 において、精度保証付き広義ニュートン法により得られた結果 (表中のすべての桁の精度は保証されている) と単精度、及び倍精度の浮動小数点演算により得られた近似解を、表 4, 5 において比較する。それぞれについて、下線部が浮動小数点演算の数値計算結果に保証される精度であると結論できる。

表 4: 単精度浮動小数点演算により得られた近似解の精度保証 ($m = 5$)

	単精度浮動小数点演算 で得られた近似解	精度保証付き広義ニュートン法 で得られた近似解
$x[1]$	<u>0.26562473177909851</u>	0.26562473538180887
$x[2]$	<u>0.35824570059776306</u>	0.35824570364866783
$x[3]$	<u>0.42931628227233887</u>	0.42931627225257159
$x[4]$	<u>0.48923152685165405</u>	0.48923153313178784
$x[5]$	<u>0.54201793670654297</u>	0.54201793763182990

注) 下線部が精度の保証されている桁

表 5: 倍精度浮動小数点演算により得られた近似解の精度保証 ($m = 5$)

	倍精度浮動小数点演算 で得られた近似解	精度保証付き広義ニュートン法 で得られた近似解
$x[1]$	<u>0.26562473538180886</u>	0.26562473538180887
$x[2]$	<u>0.35824570364866781</u>	0.35824570364866783
$x[3]$	<u>0.42931627225257157</u>	0.42931627225257159
$x[4]$	<u>0.48923153313178785</u>	0.48923153313178784
$x[5]$	<u>0.54201793763182993</u>	0.54201793763182990

注) 下線部が精度の保証されている桁

注意 3 $\|f'(X^{(0)})\|$ の値は、作用素ノルムの定義 (14) より、

$$\|f'(X^{(0)})\| = \max\{1, \max_{1 \leq i \leq m-1} 1 + r(2x_i - 1)\}, \quad (84)$$

により計算される。また、式 (82) を満たすような $\delta > 0$ の存在は、

$$m\eta\|f'(X^{(0)})\| < c, \quad (85)$$

$$\frac{8r\xi\|L\|^2}{(c - m\eta\|f'(X^{(0)})\|)^2} < 1, \quad (86)$$

の成立により確かめられる。このとき、 $\delta > 0$ は、

$$\bar{\delta} - d < \delta < \bar{\delta} + d, \quad (87)$$

の範囲から選べる。ここで、

$$\bar{\delta} = \frac{c - m\eta\|f'(X^{(0)})\|}{4r\|L\|}, \quad (88)$$

$$d = \sqrt{\bar{\delta}^2 - \frac{\xi}{2r}}. \quad (89)$$

但し、式 (89) における d の値は、真の値よりも小さい有理数として、近似的に計算される。

□

系 1 により、真の軌道の存在を検証するには、近似軌道 $X^{(0)} \in U \cap Q^m$ を生成するときの丸めの大きさ $\xi > 0$ 、及び、 L を構成する際のヤコビ行列の逆行列 $f'(X^{(0)})^{-1}$ の各要素の丸めの大きさ $\eta > 0$ を適当に定めてやらなければならない。実際、 $\|L\|$ の値はそれほど ξ 、 η に依存しない。予め $\|L\|$ のおおよその値が見積もれているとき、系 1 の条件が成立するような ξ 、 η の値の範囲が次の補題 3 により与えられる。

補題 3

$$\xi < \frac{c^2}{8r\|L\|^2}, \quad (90)$$

$$\eta < \frac{1}{m\|f'(X^{(0)})\|} \left(c - 2\|L\|\sqrt{2r\xi} \right), \quad (91)$$

を満たすように、 ξ 、 η を定めれば、系 1 の条件が成立する。

□

(証明) まず、 ξ を固定したとき、式 (85) より、

$$\eta < \frac{c}{m\|f'(X^{(0)})\|}, \quad (92)$$

式 (86) より,

$$\eta < \frac{1}{m\|f'(X^{(0)})\|} (c - 2\|L\|\sqrt{2r\xi}), \quad \eta > \frac{1}{m\|f'(X^{(0)})\|} (c + 2\|L\|\sqrt{2r\xi}), \quad (93)$$

よって,

$$\eta < \frac{1}{m\|f'(X^{(0)})\|} (c - 2\|L\|\sqrt{2r\xi}). \quad (94)$$

また, このような $\eta > 0$ が存在するためには,

$$c - 2\|L\|\sqrt{2r\xi} > 0, \quad (95)$$

すなわち,

$$\xi < \frac{c^2}{8r\|L\|^2}. \quad (96)$$

□

反復 (75) により生成される点列の振る舞いはパラメータ r によって異なることが知られている. $m = 100$ とし, (i) $r = 3.1$ (2 周期解), (ii) $r = 3.186$ (カオス解), の 2 通りについてアルゴリズム 3 により生成される軌道の精度保証を系 1 の条件成立を確かめる事により行う.

(i), (ii) それぞれの場合について, 検証する軌道 $X^{(0)}$ を生成する際の丸め ξ , 行列 L を構成する際の丸め η , $\|L\|$, $\|f'(X^{(0)})\|$ の値, 及び, このとき系 1 により評価される (85), (86) の左辺の値, 真の軌道との誤差 δ , K_0 を表 6 に示す (これらの値はすべて計算機上では有理数として評価されている). なお ξ , η の値は補題 3 を考慮して定めたので, 系 1 の条件成立が確かめられている. (ii) の場合は, 条件成立の時点ですでに十分な精度が得られているが, (i) の場合については, さらに精度保証付き広義ニュートン法反復により近似解の精度を高めた.

表 7, 8 に倍精度浮動小数点演算により反復 (75) により生成した軌道と, 有理数演算により小数点以下 20 桁の精度が保証されている軌道を示す. $r = 3.1$ の場合, 表 7 より倍精度浮動小数点演算による反復で生成された軌道的小数点以下桁 14 桁以降の精度は, 有理数演算による検証で保証されている (下線部が精度の保証されている桁). ところが, $r = 3.186$ の場合, 表 8 より倍精度浮動小数点演算による反復で生成された軌道の精度は反復を重ねるごとに落ち, x_{80} 以降では 1 桁も信頼できないことがわかる.

表 6: ロジスティック写像の真の軌道の存在検証

	(i) $r = 3.1$	(ii) $r = 3.816$
ξ	1.0×10^{-6}	1.0×10^{-38}
η	1.0×10^{-4}	1.0×10^{-4}
$\ L\ $	21.8	6.81×10^{-17}
$\ f'(X^{(0)})\ $	2.64	4.46
c	$\frac{1}{5}$	1
(85) の左辺	2.64×10^{-2}	4.46×10^{-2}
(86) の左辺	3.91×10^{-2}	1.55×10^{-1}
δ	$\frac{1}{1558}$	$\frac{1}{1088361055354512637}$
K_0	1.13×10^{-1}	—

注) 表中の $\|L\|$, $\|f'(X^{(0)})\|$, (85),(86) の左辺, K_0 の値は大体の値

7 むすび

本稿では、非線形方程式の近似解が何らかの方法により与えられているとき、まず、有理数演算による真解の存在を厳密に検証し、近似解の精度保証が行えることを示した。さらに、有理数の適当な丸めを考慮して、近似解の精度を任意に高める精度保証付き広義ニュートン法反復を示した。

謝辞 日頃ご指導頂く早稲田大学堀内和夫教授に感謝いたします。本研究の一部は文部省科学研究費補助金、及び、早稲田大学特定課題研究の補助を受けた。

表 7: ロジスティック写像の軌道の精度保証 ($r = 3.1, 2$ 周期解)

	倍精度浮動小数点演算による 反復で生成された軌道	有理数演算により 検証された軌道
x_{50}	<u>0.55802049294539524</u>	0.55802049294539529374
x_{51}	<u>0.76456422943495738</u>	0.76456422943495733834
x_{52}	<u>0.55801788236081040</u>	0.55801788236081048453
x_{53}	<u>0.76456516851173828</u>	0.76456516851173818247
x_{54}	<u>0.55801634199210214</u>	0.55801634199210229583
x_{55}	<u>0.76456572259175192</u>	0.76456572259175182621
x_{56}	<u>0.55801543313146295</u>	0.55801543313146307379
x_{57}	<u>0.76456604950756312</u>	0.76456604950756308371
x_{58}	<u>0.55801489688868111</u>	0.55801489688868120610
x_{59}	<u>0.76456624239088666</u>	0.76456624239088663190
x_{60}	<u>0.55801458050021646</u>	0.55801458050021652616
x_{61}	<u>0.76456635619309010</u>	0.76456635619309007884

注) 下線部が精度の保証されている桁

表 8: ロジスティック写像の軌道の精度保証 ($r = 3.816$, カオス解)

	倍精度浮動小数点演算による 反復で生成された軌道	有理数演算により 検証された軌道
x_{10}	<u>0.86493814920876221</u>	0.86493814920876077490
x_{20}	<u>0.26148857152876425</u>	0.26148857152851700325
x_{30}	<u>0.90959721035524032</u>	0.90959721040411987216
x_{40}	<u>0.28402601914144848</u>	0.28402600635377634804
x_{50}	<u>0.59559181181853082</u>	0.59559129489464975384
x_{60}	<u>0.94804322355938019</u>	0.94804744160382426368
x_{70}	<u>0.92810993771713001</u>	0.92909682257094202179
x_{80}	0.78697725696608833	0.94980407140911013376
x_{90}	0.95322041142715019	0.53257831106344527506
x_{100}	0.67131927380402134	0.168965810202954039233

注) 下線部が精度の保証されている桁

参考文献

- [1] L.V.Kantrovich and G.P.Akilov: "Functional Analysis in Normed Spaces", Pergamon Press (1964).
- [2] M.Urabe: "Convergence of Numerical Iteration in Solution of Equation", J.Soc. Hiroshima Univ.Ser., A19 pp.479-489 (1956).
- [3] M.Makino, S.Oishi, M.Kashiwagi and K.Horiuchi: "An Urabe Type A Posteriori Stopping Criterion and a Globally Convergent Property of the Simplicial Approximate Homotopy Method", IEICE Trans. E74, No.6, pp.1440-1446 (June 1991).
- [4] A.Inoue, S.Oishi, M.Makino, M.Kashiwagi and K.Horiuchi: "Self Validating Numerics for Nonlinear Equations Using Simplicial Approximation and Rational Number Arithmetics", Proc. of The Second Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications, pp.25-28 (July 15-17, 1991).
- [5] 高橋磐郎, 室谷義昭: "数値計算とその応用", コロナ社 (1979).
- [6] 小島政和: "相補性と不動点", 産業図書 (1981).