P-3

精度保証付き数値計算による常微分方程式の解の数値的存在検証
A Numerical verification of solutions for an ordinary differential equation by self-validating numerical computations

○恩地 創平 [1]
*Sohei Onchi[1]

Abstract: In this article, we verify whether solutions of a differential equation exit in a neighborhood of approximations computed by self-validating numerical computations, which is one of the numerical calculation methods considering error bound. This time, we cite an instance of a numerical verification of solutions for an ordinary differential equation by FS-Int method.

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ふくめて特定する数値計算の手法の一つである. 解析的な手法では解の存在が明らかでないような偏微分方程式においても, この手法を用いて解の存在検証を行うことができることがある. どの程度の誤差かを明らかにした上で, どの範囲内では解が存在するかを検証することとは数学的に意義があることと考える. 応用例は文献 [1] に多くある.

2. 不動点定式化について

$\hat{\mathbf{X}}$ を Banach 空間, $\mathbf{X}, \mathbf{Y}$ を Hilbert 空間とする. 埋め込みを含めた包含関係 $\hat{\mathbf{X}} \hookrightarrow \mathbf{X} \hookrightarrow \mathbf{Y}$ が成り立ち, 埋め込み $\hat{\mathbf{X}} \hookrightarrow \mathbf{X}$ はコンパクトであると仮定する. 線形作用素 $\mathcal{A} : \hat{\mathbf{X}} \to \mathbf{Y}$, 作用素 $f : \mathbf{X} \to \mathbf{Y}$ として,

$$\mathcal{A}u = f(u) \tag{1}$$

を満たすような関数 u を求めたい. 解 u を求める定式化として $\hat{\mathbf{X}} \hookrightarrow \mathbf{X}$ のコンパクト性を用いた不動点定式化を考える. この不動点定式化に伴い線形作用素 $\mathcal{A}$, 作用素 f にそれぞれ以下の条件を課すことにする.

条件 1. 任意の $\phi \in \mathbf{Y}$ に対して, $\mathcal{A}\psi = \phi$ は一意の解 $\psi \in \hat{\mathbf{X}}$ を持つ. また, この対応 $\phi \mapsto \psi$ の連続性も仮定する.

条件 2. 線形作用素 $\mathcal{A}$ は,

$$(u, v)_{\mathbf{X}} = (\mathcal{A}u, v)_{\mathbf{Y}} \quad \forall u \in \hat{\mathbf{X}}, \forall v \in \mathbf{X}$$

を満たす.

条件 3. 作用素 f は連続かつ $\mathbf{X}$ の有界集合を $\mathbf{Y}$ の有界集合に移す.

以上の条件を踏まえ,

定義 4. 不動点定式化作用素 $F : \mathbf{X} \to \mathbf{X}$ を,

$$F := \mathcal{A}^{-1} \circ f \tag{2}$$

と定める.

$\mathcal{A}^{-1} : \mathbf{Y} \to \mathbf{X}$ は, $\hat{\mathbf{X}}$ から $\mathbf{X}$ への埋め込みまで含めた対応である. つまり, $\mathcal{A}$ の逆作用素 $\mathscr{A}^{-1}$ と $\hat{\mathbf{X}}$ から $\mathbf{X}$ への埋め込み作用素 $I_{\hat{\mathbf{X}} \hookrightarrow \mathbf{X}}$ との合成写像であることに注意する.

この不動点定式化作用素 (2) を用いると, 式 (1) は不動点方程式 $u = F(u)$ と表される. この不動点方程式の解 (不動点) $u \in \mathbf{X}$ を求める. ここで今回の検証法で用いる不動点定理を紹介する.

定理 5 (Schauder の不動点定理)**.** *Banach* 空間 $\mathbf{X}$ の空でない有界凸閉集合 $\mathbf{U}$ に対し, $F : \mathbf{U} \to \mathbf{U}$ がコンパクト作用素であるとき, F は $\mathbf{U}$ に不動点を持つ.

定理 5 は F にコンパクト性を要請するが, 不動点の存在条件は $F(\mathbf{U}) := \{F(u) \in \mathbf{X}; u \in \mathbf{U}\} \subset \mathbf{U}$ を満たすことである. 解を含むことが期待される集合 $\mathbf{U}$ を候補者集合という. 定理 5 より, 有界凸閉集合 $\mathbf{U}$ に対し $F(\mathbf{U}) \subset \mathbf{U}$ を満たすかを確かめればよい.$\mathbf{X}$ の有限次元部分空間を $\mathbf{X}_h$ とし, この空間での基底を $\{\phi_i\}_{1 \le i \le N_d}$ と表す. 添え字の “h” は近似度を表す正数で “h が小さければ $\mathbf{X}_h$ は $\mathbf{X}$ をよく近似できる” ことを表現している. $\mathbf{X}_h$ は Hilbert 空間 $\mathbf{X}$ の有限次元部分空間であることから閉部分空間である. 射影定理より任意の $u \in \mathbf{X}$ は

$$u = u_h + u_*, \quad u_h \in \mathbf{X}_h, \quad u_* \in \mathbf{X}_h^{\perp}$$

の形に一意に分解できる. ここで $\mathbf{X}_h^{\perp}$ は $\mathbf{X}_h$ の直交補空間である. 任意の $v_h \in \mathbf{X}_h$ は基底 $\{\phi_i\}_{1 \le i \le N_d}$ と複素数 $\{v_i\}_{1 \le i \le N_d}$ を用いて

$$v_h = \sum_{i=1}^{N_d} v_i \phi_i$$

1: 日大理工・院 (前)・数学

と表せる. ここで u から u_h への対応となる射影 $P_h : \mathbf{X} \to \mathbf{X}_h$ を

$$(u - P_h u, v_h)_{\mathbf{X}} = 0 \quad \forall v_h \in \mathbf{X}_h$$

で定める. この射影 P_h を用いて先の $\mathbf{X}_h^{\perp}$ は

$$\mathbf{X}_h^{\perp} := \{u_* \in \mathbf{X}; u_* = (I - P_h)u, u \in \mathbf{X}\}$$

と書くことができる.I は $\mathbf{X}$ 上の恒等作用素である. 任意の $u \in \mathbf{X}$ は射影 P_h により有限次元部とその誤差の形で $u = P_h u + (I - P_h)u$ に一意に分解される. 次にこの射影 P_h に近似性を仮定する.

条件 6. h に依る具体的な値を算定可能な $C(h) > 0$ が存在し, $\|(I - P_h)v\|_{\mathbf{X}} \le C(h)\,\|\mathcal{A}v\|_{\mathbf{Y}}, \quad \forall v \in \hat{\mathbf{X}}$ を満たす.

この条件 6 にある $C(h)$ は $h \to 0$ に従って $C(h) \to 0$ となる数で具体的な値を算出することが精度保証付き数値計算の検証法に必要である. この $C(h)$ の見積もりを構成的誤差評価という.

3. Finite Sequential Interval Method

逐次反復に基づく手法である FS-Int という手法を説明する. 他の手法は文献 [2] に多くある.

定義 7. 方程式 (1) の近似解を $u_h \in \mathbf{X_h}$ とする. この近似解 u_h の周りで解を包含することが期待される候補者集合 $\mathbf{U} \subset \mathbf{X}$ を $\mathbf{U} = u_h + \mathbf{U_h} + \mathbf{U}_*$ ($\mathbf{U_h} \subset \mathbf{X_h}, \mathbf{U}_* \subset \mathbf{X_h^{\perp}}$) と選ぶ. ここで $\mathbf{U}$ の有限次元部 $\mathbf{U_h}$ と無限次元部 $\mathbf{U}_*$ は具体的にそれぞれ次のように定める.
複素数区間係数 $\{\mathbf{B_i}\}_{1 \le i \le N_d}$ に対し

$$\mathbf{U_h} := \left\{ \sum_{i=1}^{N_d} v_i \phi_i \in \mathbf{X_h}; v_i \in \mathbb{C}, v_i \in \mathbf{B_i}, 1 \le i \le N_d \right\}$$

半径 $\alpha > 0$ の $\mathbf{X}$ の球として,$\mathbf{U}_* := \{u_* \in \mathbf{X_h^{\perp}}; \|u_*\| \le \alpha\}$ とする.

定義 7 から次の補題が成り立つ.

補題 8.

$$\begin{cases} P_h F(\mathbf{U}) - u_h \subset \mathbf{U_h}, \\ (I - P_h)F(\mathbf{U}) \subset \mathbf{U}_* \end{cases} \tag{3}$$

が成り立つとき,$F(\mathbf{U}) \subset \mathbf{U}$ が成立する.

有限次元部と無限次元部それぞれに対し, 包含関係 (3) の成立条件を考える.

定理 9. 定義 7 で定義された候補者集合 $\mathbf{U}$ に対し, $\boldsymbol{d} = [d_i] \in \mathbb{IC}^{\mathbf{N_d}}$ を全ての $1 \le i \le \mathbf{N_d}$ に対して

$$\{(f(u), \phi_i)_{\mathbf{Y}} - (u_h, \phi)_{\mathbf{X}} \in \mathbb{C}; u \in \mathbf{U}\} \subset d_i$$

を満たすように定める. このとき, 連立 *1* 次方程式 $D\boldsymbol{x} = \boldsymbol{d}$ の解 $\boldsymbol{x} \subset \mathbb{C}^{N_d}$ の区間包含ベクトル $\boldsymbol{v} \in \mathbb{IC}^{N_d}$ に対し, $v_i \subset \mathbf{B_i} (1 \le i \le N_d)$ が成り立てば, 補題 8 の包含関係 (3) の上式が満たされる. ただし, $\mathbb{IC}$ は複素数上の有界閉区間全体集合を表し, 行列 $D_{ij} = (\phi'_j, \phi'_i)_{\mathbf{X}}$ とした.

定理 10. 定義 7 で定義された候補者集合 $\mathbf{U}$ に対し,

$$C(h) \sup_{u \in \mathbf{U}} \|f(u)\|_{\mathbf{Y}} \le \alpha$$

が成立すれば, 補題 8 の包含関係 (3) の下式が満たされる.

4. ある常微分方程式での検証結果

では具体的な方程式を挙げて不動点 u が存在するか検証する[1]. まず扱う方程式に関する空間について述べる. $\mathbf{\Omega} = (0, 1)$ とする. この $\mathbf{\Omega}$ における k 階ソボレフ空間を $H^k(\mathbf{\Omega})$ とし, $H_0^1(\mathbf{\Omega}) := \{v \in H_0^1(\mathbf{\Omega}); v = 0 \quad \text{on } \partial\mathbf{\Omega}\}$ とおく. $\hat{\mathbf{X}} = H^2(\mathbf{\Omega}) \cap H_1^0(\mathbf{\Omega}), \mathbf{X} = H_0^1(\mathbf{\Omega}), \mathbf{Y} = L^2(\mathbf{\Omega})$ とする. また,$\mathbf{X}, \mathbf{Y}$ 空間における内積は $(u, v)_{\mathbf{X}} = (u, v)_{L^2}, (u, v)_{\mathbf{Y}} = (u', v')_{L^2}$ とする. ここでは, 常微分方程式

$$\begin{cases} -u'' - Ku = (\pi - K/\pi)\sin \pi x \quad 0 < x < 1, \\ u(0) = u(1) = 0 \end{cases} \tag{4}$$

を扱った. ただし, $K \in \mathbb{R}$ は定数とする. $\mathcal{A}u = -u''$ は条件 1,2,6 を満たし, $f(u) := Ku + (\pi - K/\pi)\sin \pi x$ は条件 3 を満たす. また, $C(h) = h/\pi$ とし, 初期区間幅は計算機イプシロンとした. 定数 K ごとに検証した有限次元部候補者集合の最大区間 $\max U_h$ と無限次元部候補者集合の最大半径 α をまとめた結果が次の Talbe 1 である.

Table 1: Verification result by FS-Int

定数 K	$\max U_h$	α
$K = 1$	0.000025662	0.0070711
$K = \pi$	0.000106981	0.0070718

定数 K が 1 や π の際には, 補題 8 を満たすように区間が定まった. よって u_h の近くに不動点 u が存在することが確かめられた. なお,K が π^2 を超えると FS-Int では検証が成功しなかったことを述べておく.

5. 参考文献

[1] 大石進一. 精度保証付き数値計算の基礎. コロナ社, 2018.

[2] 中尾充宏・渡部善隆. 実例で学ぶ 精度保証付き数値計算 理論と実装. SGC ライブラリ. サイエンス社, 2011.

[1] プロセッサ:Intel(R) Core(TM) i5-6200U, ソフトウェア:GNU Octave(version 5.2.0), ライブラリ:INTLAB(version 12) を用いた.