非線形方程式に対する解の精度保証付き数値計算

高安亮紀　(筑波大学システム情報系)*

平成 28 年 12 月 27 日

1. はじめに

本稿の目的は $x \in \mathbb{R}^n$ に関する非線形連立方程式

$$f(x) = 0 \tag{1}$$

の解 x^* を精度保証付き数値計算によって数学的に正しく得るための標準的な手法（Newton-Kantorovich の定理, Krawczyk の検証法, 区間 Newton 法）を紹介することである．ここで $D \subseteq \mathbb{R}^n$ は f の定義域, $f : D \to \mathbb{R}^n$ は一階連続微分可能な関数 $(f = (f_1, ..., f_n))$ とする．一般的に非線形方程式の厳密な求解は難しいとされ, 数値解析においては適当な初期値 x_0 から何らかの反復法により近似解列 $\{x_k\}$ を計算し, 解 x^* に十分近い近似解 x_0 を得る．数値計算による非線形方程式の求解は Newton 法が標準的である．以下に非線形方程式に対して解を精度保証付き数値計算する各手法を紹介し, 非線形方程式に対する精度保証付き数値計算を低次元トポロジーに応用した例を紹介する．

2. Newton-Kantorovich の定理

Newton 法は 1669 年 I. Newton が 3 次代数方程式 $3x^3 - 2x - 5 = 0$ の求解のために提案して以来, その収束性, 数値解の精度や抽象空間への拡張が多くの研究者によってなされてきた．現代では Newton 法の解近傍での振舞い（局所的 2 次収束性）が多くの数値解析の書籍において議論されている（例えば [7, 8] など）．それらの多くは真の解 x^* の存在を仮定し, 初期値 x_0 を x^* の十分近くに選ぶ事を要求する．このような定理は局所的収束定理（Local Convergence Theorem）と呼ばれている．局所的収束定理では真の解 x^* の存在を仮定するため, 解 x^* の存在検証はできない．よって精度保証付き数値計算には利用することができない．

一方で, 真の解の存在を仮定せずに, 初期値 x_0 がある条件をみたすとき解の存在と反復の収束を示す定理を半局所的収束定理（Semi-Local Convergence Theorem）という．Newton 法に関する半局所的収束定理は 1948 年に L. V. Kantorovich によって, $\mathbb{R}^n$ を含む抽象空間（Banach 空間[1]）において示された [14]．この定理は解の存在そのものを保証する定理であり, 現在は Newton-Kantorovich の定理と呼ばれ広く知られている．

以下に Banach 空間 X 上での Newton-Kantorovich の定理を紹介する．本稿では非線形連立方程式 (1) のみを考え, 以下の定理は $X = \mathbb{R}^n$ と限定し, 写像 f の Frechét 微分 $f'[x]$ は Jacobi 行列 $J(x)$ と読みかえてしまって差し支えない．

Banach 空間 X に対し, そのノルムを $\|\cdot\|$ と記述する．部分集合 $D \subseteq X$ 上に定義された写像 $f : D \to X$ に対して方程式 $f(x) = 0$ を考える．このとき, 近似解 x_0 における f

* 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1
e-mail: `takitoshi@risk.tsukuba.ac.jp`

[1] 完備なノルム空間．すなわち X をノルムが定義された空間とし, X 内の任意の Cauchy 列 $\{x_n\}_{n\ge 0}$ に対して, X のノルムの意味で $x = \lim_{n\to\infty} x_n$ となる $x \in X$ が存在する．

の Frechét 微分は $f'[x_0] : D \to X$ と表し, 次をみたす線形写像とする.

$$\|f(x_0+\nu)-f(x_0)-f'[x_0]\nu\| = o(\|\nu\|),\ \forall \nu \in X.$$

ここで $o(\|\nu\|)$ は高次の無限小を表し, $\lim_{\|\nu\|\to 0}\frac{o(\|\nu\|)}{\|\nu\|}=0$ をみたす.

定理 1 (Newton-Kantorovich の定理) D_0 を D の開凸部分集合とする. $f : D \subseteq X \to X$ が D_0 において微分可能な写像とし, ある $x_0 \in D_0$ において f の Frechét 微分 $f'[x_0]$ が正則であるとする. そして x_0 を初期値とする X 上の Newton 法を考え, 次の条件が成り立つと仮定する.

1. $f'[x]$ に対し, D_0 上で

   $$\|f'[x_0]^{-1}(f'[x]-f'[y])\| \le \omega\|x-y\|,\ \forall x,y \in D_0.$$

   をみたす定数 $\omega > 0$ が存在する.

2. x_0 において

   $$\left\|f'[x_0]^{-1}f(x_0)\right\| \le \alpha$$

   をみたす $\alpha > 0$ が存在し, $\alpha\omega \le \frac{1}{2}$ となる. このとき

   $$\rho^* = \frac{1-\sqrt{1-2\alpha\omega}}{\omega},\ \rho^{**} = \frac{1+\sqrt{1-2\alpha\omega}}{\omega}$$

   とする.

3. x_1 を Newton 法の反復の 1 回目で得られた近似解とし, x_1 を中心とする半径 $\rho^*-\alpha$ の閉球:

   $$\overline{U}(x_1,\rho^*-\alpha) := \{x \in X : \|x-x_1\| \le \rho^*-\alpha\}$$

   が D_0 に含まれる. すなわち $\overline{U}(x_1,\rho^*-\alpha) \subseteq D_0$ が成立する.

このとき, 次のことが成り立つ.

- $f(x)=0$ の真の解 x^* が $\overline{U}(x_1,\rho^*-\alpha)$ に存在し, その解は $\overline{U}(x_0,\rho^{**}) \cap D_0$ 上で一意である.

- x_0 を初期点とする Newton 法の近似解列 $\{x_k\}$ は x^* に収束し, 誤差上限は

  $$\|x_k-x^*\| \le \frac{(1-\sqrt{1-2\alpha\omega})^{2^k}}{2^k\omega},\ (k=0,1,2,...)$$

  と評価できる.

この定理は Newton-Kantorovich の定理の Affine 共変版（affine covariant version of the Newton-Kantorovich theorem）と呼ばれている [11]. これは Kantorovich が 1948 年に示した半局所的収束定理よりも一般化された形式であるが, 定理の主張は変わらない. そのため現在ではこちらを Newton-Kantorovich の定理と呼ぶ. 古典的な Newton-Kantorovich の定理は, Zeidler [24] に詳しい記述があり, 証明もしっかり書かれている.

和書では杉原・室田 [7] に Zeidler [24] をもとにした詳しい証明がある．さらに Newton-Kantorovich の定理にはさまざまな証明方法（山本 [23], Rall [18], Deuflhard [11] など）がある．以下では Newton-Kantorovich の定理を利用した精度保証付き数値計算法の紹介に焦点をあてる．すなわち近似解を x_0 とし, 近似解の近傍に非線形方程式の真の解が存在するかどうかを検証する．このとき, 定理 1 に対する以下の系が精度保証付き数値計算に有用である．

系 2 ある $x_0 \in D$ に対して, 写像 $f : D \to X$ の x_0 における Frechét 微分 $f'[x_0] : D \to X$ が可逆であり, 次をみたす $\alpha > 0$ が存在するとする:

$$\|f'[x_0]^{-1} f(x_0)\| \leq \alpha.$$

そして $\overline{U}\left(x_0, 2\alpha\right)$ を x_0 を中心とし, 半径 2α の X の閉球とする． いま D_0 を $D_0 \supset \overline{U}\left(x_0, 2\alpha\right)$ なる開球とし, f が D_0 において Frechét 微分可能であるとき

$$\|f'[x_0]^{-1}(f'[x] - f'[y])\| \leq \omega \|x - y\|,\ \forall x, y \in D_0$$

をみたす $\omega > 0$ が存在するとする．このとき $\alpha\omega \leq \frac{1}{2}$ ならば,

$$\rho^* = \frac{1 - \sqrt{1 - 2\alpha\omega}}{\omega},\ \rho^{**} = \frac{1 + \sqrt{1 - 2\alpha\omega}}{\omega}$$

として $f(x) = 0$ の真の解 x^* が $\overline{U}\left(x_0, \rho^*\right)$ に存在し, その解は $\overline{U}\left(x_0, \rho^{**}\right) \cap D_0$ 上で一意である．

定理 1 によれば真の解に収束するための初期値の範囲 D_0 の存在が仮定されているが, 解の数値的検証を考える場合は開凸集合 D_0 を具体的に決定する必要がある．大石 [3, 4] では簡易 Newton 法の収束定理を紹介する際に, この範囲を近似解 x_0 を中心として, 半径を 2α の閉球と取ることが「経験的に」提案されている．上記の系 2 においては D_0 を $D_0 \supset \overline{U}\left(x_0, 2\alpha\right)$ となる開球と取ることで, 定理 1 の条件 (3) を自動でみたす．すなわち, $x \in \overline{U}\left(x_1, \rho^* - \alpha\right)$ とすると $\|x - x_0\| \leq \|x - x_1\| + \|x_1 - x_0\| \leq \rho^*$． これと $0 \leq 1 - 2\alpha\omega \leq 1$ より

$$\begin{aligned} 2\alpha - \rho^* &= 2\alpha - \frac{1 - \sqrt{1 - 2\alpha\omega}}{\omega} \\ &= \frac{1}{\omega}\left(\sqrt{1 - 2\alpha\omega} - (1 - 2\alpha\omega)\right) \geq 0. \end{aligned}$$

よって $x \in D_0$ であり, 定理 1 の条件 (3): $\overline{U}\left(x_1, \rho^* - \alpha\right) \subseteq D_0$ が常に成立する．

2.1. 検証例

Newton-Kantorovich の定理の系 2 を利用した数値的検証例を紹介する．$\mathbb{R}^2$ 上に定義された非線形連立方程式

$$f(x, y) = x^2 + y^2 - 1 = 0, \quad g(x, y) = x^2 - y^4 = 0$$

を考え, その解の存在と局所一意性を数値的に検証する．この方程式の解は

$$(x^*, y^*) = \left(\pm\frac{\sqrt{5} - 1}{2}, \pm\sqrt{\frac{\sqrt{5} - 1}{2}}\right) \quad \text{（複合任意）}$$

と代数的操作により書けるため, 真の解の包含ができているか確認することができる.

いま Newton 法によって $(x_0, y_0) = (0.618033968993930, 0.786151414622684)$ という数値解が得られたとする. 点 (x_0, y_0) における Jacobian は

$$J(x_0, y_0) = 2 \begin{bmatrix} x_0 & y_0 \\ x_0 & -2y_0^3 \end{bmatrix}$$

となり, 系 2 における α の値は $\alpha = 3.686525877033486 \times 10^{-8}$. ただしノルムは無限大ノルムである. そして $\overline{U}\left((x_0, y_0), 2\alpha\right)$ を中心が数値解 (x_0, y_0), 半径が 2α の閉球とし, D_0 を $D_0 \supset \overline{U}\left((x_0, y_0), 2\alpha\right)$ なる開球とする. このとき任意の $(x, y), (u, v) \in D_0$ について

$$\begin{aligned}
& \left\| J(x_0, y_0)^{-1} \left(J(x, y) - J(u, v) \right) \right\| \\
= \quad & \left\| 2J(x_0, y_0)^{-1} \begin{bmatrix} x-u & y-v \\ x-u & -2(y^3 - v^3) \end{bmatrix} \right\| \\
\leq \quad & \left\| 2J(x_0, y_0)^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -2(y^2 + yv + v^2) \end{bmatrix} \right\| \left\| \begin{bmatrix} x-u \\ y-v \end{bmatrix} \right\|
\end{aligned}$$

より $\omega = 2.873976013165798$ を得た. 従って $\alpha\omega = 1.059498694250925 \times 10^{-7} < \frac{1}{2}$ より Newton-Kantorovich の定理が成立し, 真の解 (x^*, y^*) が $\overline{U}\left((x_0, y_0), \rho^*\right)$ に存在する, ここで $\rho^* = 3.686527227495900 \times 10^{-8}$ であった. これより真の解は区間ベクトル

$$\begin{bmatrix} [0.61803393212865, 0.61803400585921] \\ [0.78615137775741, 0.78615145148796] \end{bmatrix}$$

内に存在する. この結果は真の解

$$(x^*, y^*) = (0.6180339887498949..., 0.78615137775742...)$$

を内包しており, 実際に真の解の包含に成功している.

系 2 の α, ω を得るためには, 丸め誤差を考慮した区間演算を使用することが必須である. 上記結果は MATLAB 2016b [17] を用いて計算され, 区間演算のパッケージ INTLAB [21] ver. 9 を利用した. 計算コードをプログラム 1 に記す. さらに表 1 に真の解それぞれに対応する包含結果を示す.

プログラム 1: `NewtonKantorovich.m`

```
function [] = NewtonKantorovich()

tol=1e-5;
x = [0.6;0.7];

% Compute x0
while (1)
  J = [2*x(1) 2*x(2); 2*x(1) -4*x(2)^3];
  x_new = x - J\func(x);
  if (norm(x_new-x,inf)/norm(x,inf) < tol)
    break
  end
  x = x_new;
```

```
end

disp('Approximate solution is')
disp(x)

% Obtain alpha
x0 = intval(x);
J = [2*x0(1) 2*x0(2); 2*x0(1) -4*x0(2)^3];
alpha = norm(J\func(x0),inf);
disp('alpha =')
disp(mag(alpha))

% Obtain omega
% x = midrad(x,2*alpha);
y = midrad(x,2*succ(mag(alpha)));
omega = norm(J\[2 2; 2 -4*(y(1)^2+y(1)*y(2)+y(2)^2)],inf);
disp('omega =')
disp(mag(omega))

% Newton-Kantorovich theorem
disp('alpha*omega =')
disp(mag(alpha*omega))
if mag(alpha*omega) <= .5
  err = (1-sqrt(1-2*alpha*omega))/omega;
  disp('rho=')
  disp(mag(err))
  disp('The exact solution is enclosed in')
  midrad(x,mag(err))
else
  error('Newton-Kantorovich theorem is not satisfied')
end
end

function y=func(x)
y = [x(1)^2 + x(2)^2 - 1; x(1)^2 - x(2)^4];
end
```

表 1: 系 2 を利用した真の解の包含結果. 結果の数値の上付き部分は区間の上端を表し, 下付き部分は区間の下端を表す.

真の解	包含結果
$\left(\frac{\sqrt{5}-1}{2}, \sqrt{\frac{\sqrt{5}-1}{2}}\right)$	$(0.61803^{400585921}_{393212865},\ 0.786151^{45148796}_{37775741})$
$\left(\frac{\sqrt{5}-1}{2}, -\sqrt{\frac{\sqrt{5}-1}{2}}\right)$	$(0.61803^{400585921}_{393212865},\ -0.786151^{37775740}_{45148797})$
$\left(-\frac{\sqrt{5}-1}{2}, \sqrt{\frac{\sqrt{5}-1}{2}}\right)$	$(-0.61803^{393212865}_{400585921},\ 0.786151^{45148797}_{37775740})$
$\left(-\frac{\sqrt{5}-1}{2}, -\sqrt{\frac{\sqrt{5}-1}{2}}\right)$	$(-0.61803^{393212865}_{400585921},\ -0.786151^{37775741}_{45148796})$

Newton-Kantorovich の定理を利用した非線形方程式 (1) に対する解の精度保証付き数値計算法は無限次元空間である Banach 空間上に定義された非線形方程式（楕円型偏微分方程式）に対する解の検証に拡張可能である.

3. Krawczykによる解の検証法

非線形方程式(1)に対して, Krawczyk（クラフチック）による解の検証手法を紹介する. $\mathbb{R}$上の区間を$\boldsymbol{a} := \{x \in \mathbb{R} : \underline{a} \le x \le \overline{a},\ \underline{a}, \overline{a} \in \mathbb{R}\} = [\underline{a}, \overline{a}]$と表し, 区間の全体を$\mathbb{IR}$とする. 区間$\boldsymbol{a}$の中点を$\mathrm{mid}(\boldsymbol{a}) \in \mathbb{R}$, 区間$\boldsymbol{a}$の半径を$\mathrm{rad}(\boldsymbol{a}) \in \mathbb{R}$で表す. さらに区間ベクトル, 区間行列は各要素が区間のベクトルおよび行列とし, 区間ベクトルの全体は$\mathbb{IR}^n$, m行n列の区間行列の全体は$\mathbb{IR}^{m \times n}$とそれぞれ表す. さらに区間ベクトル, 区間行列の中点, 半径は各要素ごとに定義されているとする.

3.1. 平均値形式とKrawczyk写像

はじめに$\boldsymbol{I} \in \mathbb{IR}^n$を区間ベクトルとする. 写像$f$に対する簡易Newton写像$s : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$を次で定義する.

$$s(x) := x - Rf(x), \tag{2}$$

ここで$R \in \mathbb{R}^{n \times n}$は$n$次元正方行列とし, $c \in \boldsymbol{I}$を(1)のある近似解として, cにおけるJacobi行列$J(c)$の近似逆行列（$R \simeq J(c)^{-1}$）とする.

このときもし行列Rが可逆ならば, 方程式$f(x) = 0$をみたすベクトルxが存在することと, xが不動点形式$s(x) = x$をみたすことは同値となる. そしてsが区間ベクトル$\boldsymbol{I}$から$\boldsymbol{I}$への縮小写像となれば, 縮小写像の原理から(1)の真の解x^*が$\boldsymbol{I}$内に一意存在することが示せる.

しかし, 写像sの区間$\boldsymbol{I}$における区間拡張$s_{[\,]}(\boldsymbol{I})$を考えると常に

$$s_{[\,]}(\boldsymbol{I}) = \boldsymbol{I} - Rf_{[\,]}(\boldsymbol{I}) \not\subset \boldsymbol{I}$$

が成立することとなり, 単に区間拡張するだけでは縮小写像の原理をみたすことは示せない[2]. そこで区間演算による区間の増大を抑制するための基本手法である平均値形式（mean value form）を導入する.

定理 3 写像$f : D \to \mathbb{R}^n$が区間$\boldsymbol{I} \subset D$において一階連続微分可能とする. このとき$x,\ \tilde{x} \in \boldsymbol{I}$に対して

$$f(x) \in f(\tilde{x}) + f'_{[\,]}(\boldsymbol{I})(x - \tilde{x})$$

が成立する. ここで$f'_{[\,]}(\boldsymbol{I})$は写像$f$のJacobi行列$J(x)$の区間$\boldsymbol{I}$における区間拡張とする.

証明. $\tilde{x} \in \boldsymbol{I}$を一つ固定する. 多変数に対する平均値の定理より, ある$\xi_1, ..., \xi_n \in \boldsymbol{I}$が存在し,

$$f(x) = f(\tilde{x}) + \begin{bmatrix} \partial_1 f_1(\xi_1) & \cdots & \partial_n f_1(\xi_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \partial_1 f_n(\xi_n) & \cdots & \partial_n f_n(\xi_n) \end{bmatrix} (x - \tilde{x}),\ x \in \boldsymbol{I} \tag{3}$$

が成り立つ. 一般的に各ξ_iは異なるため, (3)の行列は各行ごとにJacobi行列$J(\xi_i)$と一致する. このとき, fのJacobi行列$J(x)$の区間$\boldsymbol{I}$における区間拡張$f'_{[\,]}(\boldsymbol{I})$を用いると$\xi_1, ..., \xi_n \in \boldsymbol{I}$より

$$\begin{bmatrix} \partial_1 f_1(\xi_1) & \cdots & \partial_n f_1(\xi_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \partial_1 f_n(\xi_n) & \cdots & \partial_n f_n(\xi_n) \end{bmatrix} \in f'_{[\,]}(\boldsymbol{I})$$

[2] 写像sが区間$\boldsymbol{I}$において縮小写像になることは簡易Newton法の収束定理によって示すことができる. 例えば大石[4]の定理3.10を参照せよ.

が成り立つため, 区間演算の包含原則から, 定理が成立する.

簡易 Newton 写像 s の点 $c \in \boldsymbol{I}$ における平均値形式によって Krawczyk 写像 $K : \mathbb{IR}^n \to \mathbb{IR}^n$ が以下で定義できる.

$$K(\boldsymbol{I}) := c - Rf_{[\,]}(c) + \left(E - Rf'_{[\,]}(\boldsymbol{I})\right)(\boldsymbol{I} - c), \tag{4}$$

ここで $E \in \mathbb{R}^{n\times n}$ を単位行列, $f'_{[\,]}(\boldsymbol{I})$ は写像 f の Jacobi 行列 $J(x)$ の区間 $\boldsymbol{I}$ における区間拡張とする.

Krawczyk 写像は R. Krawczyk によって提案され [15, 16], S. M. Rump によって実用的な数値的検証手法としてはじめて紹介された [20]. 上で紹介したように, $K(\boldsymbol{I})$ は簡易 Newton 写像の平均値形式に相当し, $s(\boldsymbol{I}) \subseteq K(\boldsymbol{I})$ が成立する. 従って Krawczyk 写像の縮小性

$$K(\boldsymbol{I}) \subset \mathrm{int}(\boldsymbol{I}) = \{x = (x_1, \cdots, x_n) \in \boldsymbol{I} : \underline{x}_i < x_i < \overline{x}_i \ (i = 1, \cdots, n)\}$$

を区間演算を用いて検証することで, 解の区間内での一意存在を示すことができる. その実装は Newton-Kantorovich の定理を使用した精度保証付き数値計算法よりも直接的で容易であり, 後に説明する自動微分の実装と組み合わせることで現代区間解析の標準的な手法となっている.

3.2. Krawczyk 写像による解の検証定理

Krawczyk 写像 (4) を用いて (1) の解が区間 $\boldsymbol{I}$ 内に一意的に存在するための十分条件を定理として記述する. 実際の計算ではこの十分条件を区間演算によって検証することで精度保証付き数値計算を行う.

定理 4 与えられた区間ベクトル $\boldsymbol{I} \in \mathbb{IR}^n$ に対して $\mathrm{int}(\boldsymbol{I})$ を $\boldsymbol{I}$ の内包とする. もし

$$K(\boldsymbol{I}) \subset \mathrm{int}(\boldsymbol{I}) \tag{5}$$

が成立するならば, 非線形方程式 (1) の真の解 x^* は $\boldsymbol{I}$ 内に一意的に存在する. さらに R と $C \in f'_{[\,]}(\boldsymbol{I})$ をみたすすべての行列（真の解における Jacobian $J(x^*)$ を含む）は正則となる.

証明. 証明は条件 (5) のもとで, (2) において定義された簡易 Newton 写像 s が縮小写像となることを示す. まず, 区間拡張 $f'_{[\,]}(\boldsymbol{I})$ と平均値の定理から任意の $x, y \in \boldsymbol{I}$ に対して

$$\begin{aligned} s(x) - s(y) &= x - y - R(f(x) - f(y)) \\ &= x - y - R\int_0^1 f'(y + t(x-y))(x-y)dt \\ &\in \left(E - Rf'_{[\,]}(\boldsymbol{I})\right)(x - y) \end{aligned} \tag{6}$$

が成り立つ. ここで $y = c$, $x \in \boldsymbol{I}$ とすると

$$s(x) \in c - Rf_{[\,]}(c) + \left(E - Rf'_{[\,]}(\boldsymbol{I})\right)(\boldsymbol{I} - c) = K(\boldsymbol{I})$$

となる. よって (5) から $s(\boldsymbol{I}) \subset K(\boldsymbol{I}) \subset \mathrm{int}(\boldsymbol{I})$ である.

次に (6) より, あるノルムのもとで $\left\| E - Rf'_{[\,]}(\boldsymbol{I}) \right\| < 1$ が成り立つならば写像 s の縮小性が示せる. そこでベクトル $x = (x_1, \cdots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$ に対するスケーリング最大ノルムを以下のように定義する.

$$\|x\|_u = \max_{1 \le i \le n} \frac{|x_i|}{u_i},$$

ここで $u = (u_1, \cdots, u_n)^T$ が $u_i > 0$ をみたすスケーリングベクトルである. このノルムは区間ベクトル $\boldsymbol{I}$ に対しても $\|\boldsymbol{I}\|_u = \sup_{x \in \boldsymbol{I}} \|x\|_u$ として定義される. またこのノルムから導かれる行列ノルムは行列 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ に対して

$$\|A\|_u := \max\{\|Ax\|_u : \|x\|_u = 1\} = \||A|u\|_u$$

である. 条件 (5) より

$$\begin{aligned} \mathrm{rad}\,(\boldsymbol{I}) &> \mathrm{rad}\,(K(\boldsymbol{I})) \\ &\ge \mathrm{rad}\left(\left(E - Rf'_{[\,]}(\boldsymbol{I})\right)(\boldsymbol{I} - c)\right) \\ &= \mathrm{mag}\left(E - Rf'_{[\,]}(\boldsymbol{I})\right) \cdot \mathrm{rad}(\boldsymbol{I}) \end{aligned}$$

をみたす. そこでスケーリングベクトルとして $u = \mathrm{rad}\,(\boldsymbol{I})$ と選ぶことにより次を得る.

$$\left\| E - Rf'_{[\,]}(\boldsymbol{I}) \right\|_u = \left\| \mathrm{mag}\left(E - Rf'_{[\,]}(\boldsymbol{I})\right) \cdot \mathrm{rad}(\boldsymbol{I}) \right\|_u < 1. \tag{7}$$

以上より簡易 Newton 写像 s の縮小性が示せた.

従って, 縮小写像の原理より $x = s(x)$ をみたす不動点 x が区間 $\boldsymbol{I}$ 内に一意存在し, その不動点において $Rf(x) = 0$ をみたす. さらに (7) より, 行列 $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$ と $C \in f'_{[\,]}(\boldsymbol{I})$ をみたす全ての行列が正則となる [3]. ゆえに行列 R の正則性と s が不動点 x を持つことより, 条件 (5) が成立すれば, 非線形方程式 (1) の真の解 x^* の区間 $\boldsymbol{I}$ 内での一意存在も示される.

Krawczyk 写像を利用すると解の存在検証ができるだけでなく, 解の非存在も示すことができる. すなわち $\boldsymbol{I} \setminus K(\boldsymbol{I})$ には解が存在しない. 従って以下の系を得る.

系 5 与えられた区間ベクトル $\boldsymbol{I} \in \mathbb{IR}^n$ に対して

$$K(\boldsymbol{I}) \cap \boldsymbol{I} = \emptyset \tag{8}$$

ならば, 非線形方程式 (1) の解は $\boldsymbol{I}$ 内に存在しない.

4. Krawczyk の方法による検証例

前節までは実数区間 $\mathbb{IR}$ 上での Krawczyk の方法に関する理論を紹介した. 実際に Krawczyk による非線形方程式 (1) の解の精度保証付き数値計算には機械区間演算を用いることになる. そこで機械区間 $\boldsymbol{I} \in \mathbb{IF}^m$ に対する写像 $F_{[\,]} : \mathbb{IF}^m \to \mathbb{IF}^m$ と $F'_{[\,]} : \mathbb{IF}^m \to \mathbb{IF}^{m \times m}$ をそれぞれ

$$F_{[\,]}(\boldsymbol{I}) \supset \{f(x) : \forall x \in \boldsymbol{I}\}, \tag{9}$$

[3] 7 から行列 $M \in \left(E - Rf'_{[\,]}(\boldsymbol{I})\right)$ のスペクトル半径が $\rho(M) < 1$ となり, 行列 R と $C \in f'_{[\,]}(\boldsymbol{I})$ をみたす全ての行列が正則となる. 証明は背理法であり, もしも正則でないとすると行列 M は少なくとも一つ固有値 1 を持つ. しかしこれは $\rho(M) < 1$ に矛盾する.

$$F'_{[\,]}(\boldsymbol{I}) \supset \{f'(x) : \forall x \in \boldsymbol{I}\}, \tag{10}$$

をみたすように定義する．これは機械区間演算を利用した f および f' の区間拡張である．区間拡張 $F'_{[\,]}(\boldsymbol{I})$ を計算するためには, その利便性と汎用性から, 4.1 節で紹介する自動微分を用いるのが標準的である．機械区間演算による Krawczyk 写像の区間拡張 $K_{[\,]} : \mathbb{IF}^m \to \mathbb{IF}^m$ は

$$K_{[\,]}(\boldsymbol{I}) := c - RF_{[\,]}(c) + \left(E - RF'_{[\,]}(\boldsymbol{I})\right)(\boldsymbol{I} - c)$$

で定義され, 任意の $\boldsymbol{I} \in \mathbb{IF}^m$ について $K_{[\,]}(\boldsymbol{I}) \supset K(\boldsymbol{I})$ が成立する． よって, 当然ながら $K_{[\,]}(\boldsymbol{I}) \subset \mathrm{int}(\boldsymbol{I})$ の成立を機械区間演算によって検証すれば, 定理 4 の十分条件 $K(\boldsymbol{I}) \subset \mathrm{int}(\boldsymbol{I})$ もみたされる．従って, 条件 $K_{[\,]}(\boldsymbol{I}) \subset \mathrm{int}(\boldsymbol{I})$ の成立を計算機で数値的に検証することで非線形方程式 (1) の解の存在証明が可能である．

次に, 条件 $K_{[\,]}(\boldsymbol{I}) \subset \mathrm{int}(\boldsymbol{I})$ が成立することが期待される候補区間 $\boldsymbol{I} \in \mathbb{IF}^m$ の選び方を紹介する．いま $c \in \mathbb{F}^m$ を (1) の数値計算で得られた近似解とする．典型的な選び方は候補区間 $\boldsymbol{I}$ を

$$\boldsymbol{I} = \begin{bmatrix} [c_1 - r, c_1 + r] \\ [c_2 - r, c_2 + r] \\ \vdots \\ [c_m - r, c_m + r] \end{bmatrix}, \; r := 2\|Rf(c)\|_\infty \tag{11}$$

とする．ここで $\|\cdot\|_\infty$ はベクトルの最大値ノルムを表す．もう一つ, 柏木 [5] によって提案された方法は $r = |Rf(c)| \in \mathbb{F}^m$ をベクトルとして考え, 候補区間 $\boldsymbol{I}$ を

$$\boldsymbol{I} = \begin{bmatrix} [c_1 - u_1, c_1 + u_1] \\ [c_2 - u_2, c_2 + u_2] \\ \vdots \\ [c_m - u_m, c_m + u_m] \end{bmatrix}, \; u_i = r_i + \frac{1}{n}\sum_k r_k \tag{12}$$

で与える．前者に比べ後者のほうが, 条件 $K_{[\,]}(\boldsymbol{I}) \subset \mathrm{int}(\boldsymbol{I})$ が成立しやすいことが数値実験による比較で分かっている [5].

4.1. 自動微分を使った Jacobian の計算

区間拡張 $F'_{[\,]}(\boldsymbol{I})$ を計算する方法としてもっとも標準的な実装方法は自動微分を利用することである．自動微分法の起源や歴史をここで紹介することはしないが, Rall [19], Corliss et al.[10], Griewank [12], 和文では伊理 [2], 伊理・久保田 [1], 久保田・伊理 [6] などを参照されたい．ここではボトムアップ型（Forward mode）自動微分を利用して区間拡張 $F'_{[\,]}(\boldsymbol{I})$ を計算する方法を紹介する．

自動微分の実装には自動微分を実行するオブジェクト（object）を用意する．このオブジェクトはデータ構造とオブジェクト間の演算から構成される．データ構造は区間ベクトル $\boldsymbol{I}$ が n 個の要素からなるとすると $(d_0, d_1, d_2, \cdots, d_n) \in \mathbb{IF}^{n+1}$ という形をしている．このデータ構造をもつオブジェクトに次のような演算規則を定義する．

いま $u : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ をある単項演算, $U : \mathbb{IR} \to \mathbb{IR}$ をその区間拡張とし, u は微分可能とする．単項演算 u の微分を $u' : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ で表す（この u' は手計算で得るような通常の意味での微分を意味する）．また $U' : \mathbb{IR} \to \mathbb{IR}$ を u' の区間拡張とする．そして u

のボトムアップ型自動微分 $\tilde{U}(p) : \mathbb{IF}^{n+1} \to \mathbb{IF}^{n+1}$ を $p = (p_0, p_1, \cdots, p_n) \in \mathbb{IF}^{n+1}$ から $\tilde{U}(p) = (r_0, r_1, \cdots, r_n) \in \mathbb{IF}^{n+1}$ への写像として定義する．ここで各 r_i は

$$
\begin{aligned}
r_0 &:= U(p_0), \\
r_i &:= U'(p_0)p_i \ (i = 1, \cdots, n)
\end{aligned}
$$

により定める．

次に $b : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ を微分可能な 2 項演算:$(x, y) \mapsto b(x, y)$ とし，b の区間拡張を $B : \mathbb{IR} \times \mathbb{IR} \to \mathbb{IR}$ で表す．演算 b の変数 x に関する偏微分を $\partial_x b : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, 変数 y に関する偏微分を $\partial_y b : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ とする．一例として四則演算に関する各偏微分 $\partial_x B(p_0, q_0)$, $\partial_y B(p_0, q_0)$ を表 2 に紹介しておく．さらに偏微分 $\partial_x b$, $\partial_y b$ の区間拡張をそれぞれ $\partial_x B : \mathbb{IR} \times \mathbb{IR} \to \mathbb{IR}$, $\partial_y B : \mathbb{IR} \times \mathbb{IR} \to \mathbb{IR}$ とする．そして b のボトムアップ型自動微分 $\tilde{B} : \mathbb{IF}^{n+1} \times \mathbb{IF}^{n+1} \to \mathbb{IF}^{n+1}$ を $p = (p_0, p_1, \cdots, p_n)$, $q = (q_0, q_1, \cdots, q_n) \in \mathbb{IF}^{n+1}$ から $\tilde{B}(p, q) = (r_0, r_1, \cdots, r_n)$ への写像として定義する．各 r_i は

$$
\begin{aligned}
r_0 &:= B(p_0, q_0), \\
r_i &:= \partial_x B(p_0, q_0)p_i + \partial_y B(p_0, q_0)q_i \ (i = 1, \cdots, n)
\end{aligned}
$$

により定める．

表 2: 四則演算に関する偏微分

	$\partial_x B(p_0, q_0)$	$\partial_y B(p_0, q_0)$
$p + q$	1	1
$p - q$	1	-1
$p \cdot q$	q_0	p_0
p/q	$1/q_0$	$-p_0/q_0^2$

上記の議論をもとに写像 $f = (f_1, \cdots, f_n)^T$ のボトムアップ型自動微分を考える．各 $f_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} \ (i = 1, \cdots, n)$ は $x = (x_1, \cdots, x_n)$ について微分可能であるとする．いま各 f_i が微分可能な単項演算と 2 項演算のみから構成されていると仮定し，$\tilde{I} \in \mathbb{IF}^{n \times (n+1)}$ を以下で定義する．

$$
\tilde{I} = \begin{bmatrix} \tilde{I}_1 \\ \tilde{I}_2 \\ \vdots \\ \tilde{I}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{I}_1 & [1,1] & [0,0] & \cdots & [0,0] \\ \boldsymbol{I}_2 & [0,0] & [1,1] & \cdots & [0,0] \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{I}_n & [0,0] & [0,0] & \cdots & [1,1] \end{bmatrix}.
$$

ここで $\tilde{I}_i \in \mathbb{IF}^{n+1}$ である．写像 f のボトムアップ型自動微分は f の各演算を自動微分に置き換えることで $\tilde{I}$ から $\tilde{F}(\tilde{I}) \in \mathbb{IF}^{n \times (n+1)}$ への写像として定義でき，$\tilde{F} : \mathbb{IF}^{n \times (n+1)} \to \mathbb{IF}^{n \times (n+1)}$ となる．$F_i : \mathbb{IR}^n \to \mathbb{IR}$ を写像 f_i の区間拡張とし，各 $j = 1, \cdots, n$ に対して f_i の偏微分を $\partial_{x_j} f_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, その区間拡張を $\partial_{x_j} F_i : \mathbb{IR}^n \to \mathbb{IR}$ で表すとする．また

$\boldsymbol{I} = (\boldsymbol{I}_1, \boldsymbol{I}_2, \ldots, \boldsymbol{I}_n)^T$ とすれば, 得られた $\tilde{F}(\tilde{I})$ について

$$\tilde{F}(\tilde{I}) = \begin{bmatrix} F_1(\boldsymbol{I}) & \partial_{x_1} F_1(\boldsymbol{I}) & \partial_{x_2} F_1(\boldsymbol{I}) & \cdots & \partial_{x_n} F_1(\boldsymbol{I}) \\ F_2(\boldsymbol{I}) & \partial_{x_1} F_2(\boldsymbol{I}) & \partial_{x_2} F_2(\boldsymbol{I}) & \cdots & \partial_{x_n} F_2(\boldsymbol{I}) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ F_n(\boldsymbol{I}) & \partial_{x_1} F_n(\boldsymbol{I}) & \partial_{x_2} F_n(\boldsymbol{I}) & \cdots & \partial_{x_n} F_n(\boldsymbol{I}) \end{bmatrix},$$

が成立する. 自動微分によって得た $\tilde{F}(\tilde{I})$ の 2 列目から最終列までが求める区間拡張 $F'_{[\,]}(\boldsymbol{I})$ となる.

4.2. 検証例

検証結果の比較のため, 2.1 節で考えた非線形連立方程式

$$f(x, y) = x^2 + y^2 - 1 = 0, \quad g(x, y) = x^2 - y^4 = 0$$

を再度考え, 解の存在と局所一意性を Krawczyk の方法によって検証する. 近似解は $c = (x_0, y_0) = (0.618033968993930, 0.786151414622684)$ とする. 数値計算は MATLAB2016b [17] を用いて計算し, 区間演算のパッケージ INTLAB [21] は ver. 9 を利用した[4].

式 (11) を利用した候補区間 $\boldsymbol{I}$ は

$$\boldsymbol{I} = \begin{bmatrix} [0.61803389526341, 0.61803404272445] \\ [0.78615134089216, 0.78615148835321] \end{bmatrix}$$

と与えられ, これに Krawczyk 写像を作用させた区間 $K_{[\,]}(\boldsymbol{I})$ は

$$K_{[\,]}(\boldsymbol{I}) = \begin{bmatrix} [0.61803398874986, 0.61803398874993] \\ [0.78615137775740, 0.78615137775745] \end{bmatrix}.$$

従って, 区間 $\boldsymbol{I}$ 内での解の存在条件 $K_{[\,]}(\boldsymbol{I}) \subset \mathrm{int}(\boldsymbol{I})$ が成立し, 真の解を含む区間ベクトル

$$\begin{bmatrix} [0.61803398874986, 0.61803398874993] \\ [0.78615137775740, 0.78615137775745]] \end{bmatrix}$$

が得られた. 2.1 節と同様に, この結果は真の解

$$(x^*, y^*) = (0.6180339887498949..., 0.78615137775742...)$$

を内包し, 実際に真の解の包含に成功している. 表 3 に真の解それぞれに対応する包含結果を示す. 表 1 の結果と比べると近似解が同じにもかかわらず, Krawczyk の方法による包含結果の方が精度が良いことが分かる.

注意 1 $\boldsymbol{I} \setminus K(\boldsymbol{I})$ に解が存在しないため, 解の包含結果として $K(\boldsymbol{I})$ を利用してよい.

計算に使用したコードをプログラム 2 に記す. プログラム 1 に比べて, 解の存在検証をしている部分が自動微分の実装により, 問題固有のプログラムとなっていない点に注

[4] INTLAB には自動微分が実装されている

表 3: Krawczyk の方法を利用した真の解の包含結果．結果の数値の上付き部分は区間の上端を表し，下付き部分は区間の下端を表す．

真の解	包含結果
$\left(\frac{\sqrt{5}-1}{2}, \sqrt{\frac{\sqrt{5}-1}{2}}\right)$	$(0.618033988749^{93}_{86},\ 0.78615137775574^{5}_{0})$
$\left(\frac{\sqrt{5}-1}{2}, -\sqrt{\frac{\sqrt{5}-1}{2}}\right)$	$(0.618033988749^{93}_{86},\ -0.78615137775574^{0}_{5})$
$\left(-\frac{\sqrt{5}-1}{2}, \sqrt{\frac{\sqrt{5}-1}{2}}\right)$	$(-0.618033988749^{86}_{93},\ 0.78615137775574^{5}_{0})$
$\left(-\frac{\sqrt{5}-1}{2}, -\sqrt{\frac{\sqrt{5}-1}{2}}\right)$	$(-0.618033988749^{86}_{93},\ -0.78615137775574^{0}_{5})$

意してほしい．すなわち方程式が変わり関数 `func` 内が変わっても，Krawczyk の方法による検証部分（20 行目から 39 行目）はプログラムを変える必要がない．一方で，プログラム 1 では定数 ω の計算部分（28 行目）が問題固有のプログラムとなっている．この問題を解決するためには自動微分を利用して二階微分を計算することになるが，それは問題の範囲を狭めることとなってしまう．以上の理由から，Krawczyk の方法は非線形方程式に対する解の精度保証付き数値計算の標準的手法となっている．

プログラム 2: `Krawczyk.m`

```
1  function [] = Krawczyk()
2  
3  tol=1e-5;
4  x = [0.6;0.7];
5  
6  % Compute x0
7  while (1)
8    Df = func(gradientinit(x));
9    J = Df.dx;
10   x_new = x - J\Df.x;
11   if (norm(x_new-x,inf)/norm(x,inf) < tol)
12     break
13   end
14   x = x_new;
15 end
16 
17 disp('Approximate solution is')
18 disp(x)
19 
20 % Krawczyk test
21 R = inv(Df.dx);
22 r = 2*norm(J\Df.x,inf);
23 I = midrad(x,r); % Candidate interval
24 disp('I =')
25 disp(I)
26 
27 Df = func(gradientinit(I));
28 M = eye(size(x,1)) - R*Df.dx;
29 K = x - R*func(intval(x)) + M*(I-x); % Krawczyk mapping
30 disp('K =')
31 disp(K)
32 
```

```
if all(in0(K,I))
  disp('The exact solution is enclosed in')
  disp(K)
else
  error('Krawczyk test is failed')
end
end

function y=func(x)
y = [x(1)^2 + x(2)^2 - 1; x(1)^2 - x(2)^4];
end
```

5. 区間 Newton 法

非線形方程式に対する解の精度保証付き数値計算のもう一つの方法である区間 Newton 法について簡単に紹介する．区間 Newton 法は G. Alefeld [9] によって提案された手法で次の定理を利用する．

定理 6 与えられた区間ベクトル $\boldsymbol{I} \in \mathbb{IR}^n$ に対して, $f : \boldsymbol{I} \to \mathbb{R}^n$ が一階連続微分可能な関数とする．$M \in f'_{[\,]}(\boldsymbol{I})$ をみたす任意の行列 M が正則であると仮定し, ある $x_0 \in \boldsymbol{I}$ に対して, 集合 $N(x_0, \boldsymbol{I})$ を

$$N(x_0, \boldsymbol{I}) := \left\{x_0 - M^{-1} f(x_0) : M \in f'_{[\,]}(\boldsymbol{I})\right\}$$

と定義する．このとき $N(x_0, \boldsymbol{I}) \subseteq \boldsymbol{I}$ が成立するならば, 非線形方程式 (1) の真の解 x^* が区間ベクトル $\boldsymbol{I}$ 内に一意存在する．また $N(x_0, \boldsymbol{I}) \cap \boldsymbol{I} = \emptyset$ ならば非線形方程式 (1) の解は $\boldsymbol{I}$ 内に存在しない．さらに $x^* \in N(x_0, \boldsymbol{I})$ である．

証明. S.M. Rump [22] の Theorem 13.2 の証明に従う．微積分学の基本定理

$$f(x) - f(x_0) = \int_0^1 \frac{d}{dt} f(x_0 + t(x - x_0))\, dt$$

から任意の $x \in \boldsymbol{I}$ について

$$f(x) - f(x_0) = M_x(x - x_0),\ M_x := \int_0^1 \frac{\partial f}{\partial x}(x_0 + t(x - x_0))\, dt \in f'_{[\,]}(\boldsymbol{I}) \tag{13}$$

が成り立つ．ここで関数 $g : \boldsymbol{I} \to \mathbb{R}^n$ を

$$g(x) := x_0 - M_x^{-1} f(x_0)$$

と定義すると．g は連続であり, 定理の仮定より $\{g(x) : x \in \boldsymbol{I}\} \subseteq \boldsymbol{I}$ が成り立つ．従って, Brouwer の不動点定理より

$$g(x^*) = x^* = x_0 - M_{x^*}^{-1} f(x_0)$$

をみたす不動点 $x^* \in \boldsymbol{I}$ が存在する．そしてこの x^* は (13) から $f(x^*) = 0$ をみたし, 任意の行列 $M \in f'_{[\,]}(\boldsymbol{I})$ が正則であることからその一意性も成り立つ．そして, もし $y \in \boldsymbol{I}$ が $f(y) = 0$ をみたすならば, (13) から $-f(x_0) = M_y(y - x_0)$ であり, $y = x_0 - M_y^{-1} f(x_0) \in N(x_0, \boldsymbol{I})$ が成立することから $x^* \in N(x_0, \boldsymbol{I})$ である．

MATLAB と区間演算のパッケージ INTLAB を利用して, 2.1 節, 4.2 節と同じ問題を区間 Newton 法で解く計算コードをプログラム 3 に記す．そして真の解それぞれに対応する包含結果を表 4 に示す．計算に使用する近似解と候補区間は (4.2) 節と同じものを利用し, こちらも MATLAB2016b [17], INTLAB [21] は ver. 9 で計算した．区間 Newton 法も Krawczyk の方法と同様に解の存在検証部分は同一のプログラムで動作し, 実装も容易であるため, Krawczyk の方法と並んでよく使用される．一つだけ難点があるとすれば, 区間連立一次方程式を解く必要がある点（28 行目）で, Krawczyk の方法が近似解 c における Jacobi 行列 $J(c)$ の近似逆行列 R だけを利用するのに対して, 区間 Newton 法では区間連立一次方程式を精度保証付き数値計算する必要がある．区間連立一次方程式は要素数が大きくなると計算速度が遅くなり, さらに精度が悪くなる不安がある．従って, 区間 Newton 法と Krawczyk の方法は問題によって使い分けることが良いと思われる．

プログラム 3: IntervalNewton.m

```
1  function [] = IntervalNewton()
2
3  tol=1e-5;
4  x = [-0.6;-0.7];
5
6  % Compute x0
7  while (1)
8    Df = func(gradientinit(x));
9    J = Df.dx;
10   x_new = x - J\Df.x;
11   if (norm(x_new-x,inf)/norm(x,inf) < tol)
12     break
13   end
14   x = x_new;
15 end
16
17 disp('Approximate solution is')
18 disp(x)
19
20 % Interval Newton method
21 r = 2*norm(J\Df.x,inf);
22 I = midrad(x,r); % Candidate interval
23 disp('I =')
24 disp(I)
25
26 Df = func(gradientinit(I));
27 M = Df.dx;
28 N = x - M\func(intval(x)); % Obtain N(x0, I)
29 disp('N =')
30 disp(N)
31
32 if all(in(N,I))
33   disp('The exact solution is enclosed in')
34   disp(N)
35 else
36   error('Interval Newton method is failed')
37 end
38 end
39
40 function y=func(x)
```

```
y = [x(1)^2 + x(2)^2 - 1; x(1)^2 - x(2)^4];
end
```

表 4: 区間 Newton 法を利用した真の解の包含結果. 結果の数値の上付き部分は区間の上端を表し, 下付き部分は区間の下端を表す.

真の解	包含結果
$\left(\frac{\sqrt{5}-1}{2}, \sqrt{\frac{\sqrt{5}-1}{2}}\right)$	$(0.618033988749^{91}_{88},\ 0.78615137775574^{4}_{1})$
$\left(\frac{\sqrt{5}-1}{2}, -\sqrt{\frac{\sqrt{5}-1}{2}}\right)$	$(0.618033988749^{91}_{88},\ -0.78615137775574^{1}_{4})$
$\left(-\frac{\sqrt{5}-1}{2}, \sqrt{\frac{\sqrt{5}-1}{2}}\right)$	$(-0.618033988749^{88}_{91},\ 0.78615137775574^{4}_{1})$
$\left(-\frac{\sqrt{5}-1}{2}, -\sqrt{\frac{\sqrt{5}-1}{2}}\right)$	$(-0.618033988749^{88}_{91},\ -0.78615137775574^{1}_{4})$

6. HIKMOT -Verified computations for hyperbolic 3-manifolds-

本稿の最後に, 精度保証付き数値計算を利用した3次元多様体の双曲構造の誤差評価付数値計算例を紹介する. 本手法では四面体分割されたトーラス境界を持つ3次元多様体およびその Dehn filling が完備有限体積双曲構造をもつかどうかを厳密に判定することができる. これらの成果は Python モジュール HIKMOT として公開中 [13] である. 3次元多様体の双曲性の証明は貼合せ方程式を精度保証付数値計算で厳密に解くことに帰着される. 今回は SnapPy 上で m004(5,1) と表される多様体について考える. これはトーラス境界を一つ持つ3次元多様体 m004 の (5,1) スロープに沿った Dehn filling という意味である. この m004 は正井氏の予稿の図4で描かれている八の字結び目の補空間である. 貼合せ方程式は

$$\begin{cases} z_1^5(1-z_1)^0 z_2^9(1-z_2)^{-7} = -1, \\ z_1^2(1-z_1)^{-1} z_2^2(1-z_2)^{-1} = 1, \end{cases} \iff \begin{cases} z_1^5 z_2^9 + (1-z_2)^7 = 0, \\ z_1^2 z_2^2 - (1-z_1)(1-z_2) = 0 \end{cases} \tag{14}$$

で与えられる. 方程式 (14) を $g(z) = 0$ と解釈し, 写像 $g : \mathbb{C}^2 \to \mathbb{C}^2$ は次で定義する.

$$\begin{aligned} g_1(z) &= z_1^5 z_2^9 + (1-z_2)^7 \\ g_2(z) &= z_1^2 z_2^2 - (1-z_1)(1-z_2). \end{aligned}$$

この方程式に対して, Krawczyk の方法を適用することを考える. まず, 複素写像を簡単な変換により実変数の写像と同一視する. いま n 変数の複素ベクトル $z \in \mathbb{C}^n$ が次のような構造をしていると仮定する.

$$z_i = (x_{2i-1}, x_{2i}),\ i = 1, 2, \ldots, n. \tag{15}$$

これにより複素写像 g は $f:\mathbb{R}^4\to\mathbb{R}^4$ と同一視できる．そして複素数 $z=(z_{\rm re},z_{\rm im})$ と $w=(w_{\rm re},w_{\rm im})$ に対して, 四則演算を次のように定義する．

$$\begin{aligned} z+w &:= (z_{\rm re}+w_{\rm re}, z_{\rm im}+w_{\rm im}),\\ z-w &:= (z_{\rm re}-w_{\rm re}, z_{\rm im}-w_{\rm im}),\\ z\cdot w &:= (z_{\rm re}w_{\rm re}-z_{\rm im}w_{\rm im}, z_{\rm re}w_{\rm im}+z_{\rm im}w_{\rm re}),\\ \frac{z}{w} &:= \left(\frac{z_{\rm re}w_{\rm re}+z_{\rm im}w_{\rm im}}{w_{\rm re}^2+w_{\rm im}^2}, \frac{z_{\rm im}w_{\rm re}-z_{\rm re}w_{\rm im}}{w_{\rm re}^2+w_{\rm im}^2}\right). \end{aligned}$$

ここでの $+,-,\cdot,/$ を自動微分の演算に置き換えることで, 写像 f に対する Jacobian も計算できる．すなわち, 式 (15) を次のように $\tilde{I}=\mathrm{id}_{\mathbb{C}\to\mathbb{R}}(\tilde{Z})$ あるいは $\tilde{Z}=\mathrm{id}_{\mathbb{R}\to\mathbb{C}}(\tilde{I})$ と書くとすると, 複素写像 g の各演算を自動微分と複素数演算で置き換えることで, g の区間拡張が $\tilde{G}:\mathbb{IF}^{n\times((m+1)\times 2)}\to\mathbb{IF}^{n\times((m+1)\times 2)}$ で定義できる．これにより写像 f の自動微分による結果 $\tilde{F}(\tilde{X})$ は次のように表現できる．

$$\tilde{F}(\tilde{X})=\mathrm{id}_{\mathbb{C}\to\mathbb{R}}\left(\tilde{G}\left(\mathrm{id}_{\mathbb{R}\to\mathbb{C}}\left(\tilde{X}\right)\right)\right).$$

従って, 前述のとおり $\tilde{F}(\tilde{I})$ の 2 列目から最終列までが求める区間拡張 $F'_{[\,]}(\boldsymbol{I})$ である．

6.1. 検証例

$g(z)=0$ の近似解を

$$\tilde{z}=\begin{bmatrix} 0.1295310113154524+0.3730313363875791i \\ 4.6374476446382840+1.6871823157824217i \end{bmatrix}$$

とする．4 節で紹介した Krawczyk の方法の候補者区間 $\boldsymbol{I}$ は

$$\boldsymbol{I}=\begin{bmatrix} [0.1295310113154227, 0.1295310113154820] \\ [0.3730313363875496, 0.3730313363876089] \\ [4.6374476446382538, 4.6374476446383142] \\ [1.6871823157823886, 1.6871823157824481] \end{bmatrix}$$

となり,

$$K_{[\,]}(\boldsymbol{I})=\begin{bmatrix} [0.1295310113154520, 0.1295310113154527] \\ [0.3730313363875788, 0.3730313363875796] \\ [4.6374476446382680, 4.6374476446382999] \\ [1.6871823157824033, 1.6871823157824335] \end{bmatrix}.$$

従って, 区間 $\boldsymbol{I}$ 内での解の存在条件 $K_{[\,]}(\boldsymbol{I})\subset\mathrm{int}(\boldsymbol{I})$ が成立し, (14) の真の解を含む区間ベクトルが得られた．

参考文献

[1] 伊理正夫, 久保田光一: 高速自動微分法 (I), 応用数理 1:1 (1991), 17–35.
[2] 伊理正夫: 高速自動微分法, 応用数理 3:1 (1993), 58–66.
[3] 大石進一: 非線形解析入門, サイエンス社, 1997.
[4] 大石進一: 精度保証付き数値計算, サイエンス社, 2000.

[5] 柏木雅英: 非線形方程式の近似解の精度保証における候補者集合の生成, `http://verifiedby.me/kv/krawczyk/inflate.pdf`

[6] 久保田光一, 伊理正夫: アルゴリズムの自動微分と応用, コロナ社, 1998.

[7] 杉原正顕, 室田一雄: 数値計算法の数理, 岩波書店, 1994.

[8] 山本哲朗: 数値解析入門, 増訂版, サイエンス社, 2003.

[9] G. Alefeld: Inclusion methods for systems of nonlinear equations in: J. Herzberger (Ed.), Topics in Validated Computations (1994), Studies in Computational Mathematics, Elsevier, Amsterdam, 7–26.

[10] G. Corliss, C. Faure, A. Griewank, L. Hascöet and U. Nauman: Automatic Differentiation of Algorithms: From Simulation to Optimization, Springer, 2002.

[11] P. Deuflhard: Newton Methods for Nonlinear Problems, Springer-Verlag, Berlin, 2004.

[12] A. Griewank: A mathematical view of automatic differentiation, Acta Numerica 12 (2003), 321–398.

[13] N. Hoffman, K. Ichihara, M. Kashiwagi, H. Masai, S. Oishi, and A. Takayasu: Verified computations for hyperbolic 3-manifolds, Exp. Math., 25:1 (2016), 66–78. `http://www.oishi.info.waseda.ac.jp/~takayasu/hikmot/`

[14] L. V. Kantorovich and G. P. Akilov: Functional Analysis, Pergamon Press, Oxford, 1982.

[15] R. Krawczyk: Newton-Algorithmen zur Bestimmung von Nullstellen mit Fehlerschranken, Computing 4 (1969), 187–201.

[16] R. Krawczyk: Fehlerabschätzung reeller Eigenwerte und Eigenvektoren von Matrizen, Computing 4 (1969), 281–293.

[17] MathWorks: MATLAB, `https://mathworks.com/products/matlab/`

[18] L. B. Rall: Computational Solution of Nonlinear Operator Equations, John Wiley, New York, 1973.

[19] L. B. Rall: Automatic Differentiation: Techniques and Applications, vol. 120 of Lecture Notes in Computer Science (1981), Springer.

[20] S. M. Rump: Solving algebraic problems with high accuracy, Habilitationsschrift, published in: U. W. Kulisch and W. L. Miranker (Eds), A New Approach to Scientific Computation (1983), Academic Press, 51–120.

[21] S. M. Rump: INTLAB - INTerval LABoratory in: Tibor Csendes (Ed.), Developments in Reliable Computing (1999), Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 77–104.

[22] S. M. Rump: Verification Methods: Rigorous Results using Floating-Point Arithmetic, Acta Numerica 19 (2010), 287–449.

[23] T. Yamamoto: A method for finding sharp error bounds for Newton's method under the Kantorovich assumptions, Numer. Math., 49 (1986), 203–220.

[24] E. Zeidler: Nonlinear Functional Analysis and Its Applications I: Fixed-Point Theorems, Springer-Verlag, Berlin, 1986.