小特集

9.

精度保証付き数値解析にまつわるできたてほやほやの話

大石進一

大石進一：正員 早稲田大学理工学部情報学科

A Little Bit Difficult Problem in Numerical Analysis with Guaranteed Accuracy Is Just Solved. By Shin'ichi OISHI, Member (School of Science and Engineering, Waseda University, Tokyo, 169 Japan).

1. はじめに

数値計算の誤差をすべて評価し，数学的に正しい結論を数値計算によって導くというのが精度保証付き数値計算であり，これが実用的であることは近年の計算機の発展と理論的なブレークスルーのおかげでようやく最近になってわかってきた．筆者はこの5年間，その研究に夢中になっている．このような中で筆者の研究室のドクターの学生であった柏木雅英君が有限次元非線形方程式の有界領域内のすべての解を精度保証付き数値計算を利用して必ず求められることを証明し，それをプログラムとして実装した．筆者と同じ堀内和夫研究室の出身の群馬大学山村清隆先生が群馬大学で宣伝して下さった．“方程式さえ書けば，後は計算機で自動的にすべての解が求まるプログラムを早稲田大学が作ったそうですよ”．さすがに，兄弟弟子の山村先生,宣伝をして下さるなんてありがたい．と思う間もなく，山村先生からE-mailが届いた．“生物化学工科の土橋敏明先生が多相平衡問題に現れる大変解きにくい連立非線形方程式があります．もし，それが解けたら化学の分野では重要な仕事になります，とおっしゃられてます”，という前文に続いて，A4用紙一枚程度に,方程式と簡にして要を得た説明があった．電話でも，“要するに，試験管に油と水と中性洗剤を入れたときに，これらが層になって，分離したとしますよね．この各層は完全に水だけとか油だけということはなくて，少しずつ三つの物質が混ざり合って平衡しているそうです．その平衡の条件を書いたのが平衡条件でこれが対数関数を含む非線形連立方程式になり，その混ざり具合の比率が解になるそうです”と補足してくれた．その説明に続いて，“水と油といいましたが，それがポリスチレンとメチルシクロヘキサンで，自由エネルギーがなんとかかんとかで対数関数が出てくるそうです”，などというくだりになると，頭は完全に飽和状態．

“ちょっ，ちょっと待って下さい，すべての解を求められることを証明したといっても，有界“閉”領域での，すべての解が正則なとき…などの前提条件があります”，とは今更いえなくて，“方程式を書いて下さったのですから意味はわからずとも解いてみます”というお返事をしてしまった．柏木君は，そこは大物，そんな問題が届いたことを気にもかけずに，悠然と自分の研究を進めている．そのうち，九州大学に就職して，さっさと博多へ行ってしまった．電話をしてみても，“えっと，こちらではトランジスタ回路の解の個数を研究してまして…”という感じでとりあってくれない．“これはあかん，こんなことでは大石研の信用まるつぶれや”と大阪弁で思ったかどうかは別として，新学期（1995年5月）だったのでM1の中谷君の研究テーマにして解いてもらうことにした．そして昨日（1996年2月），卒論生の遠藤咲織さんの卒論でようやくすべての解が求まって決着，今日は，この長い苦闘の顛末をお話しさせて頂きます．

2. 難しいことがわかった

ことは1995年の5月から始まる．中谷君には，“log$x$という項があるから変数xの範囲が$0<x<1$になって，考える領域が開領域になってしまうけど，まずは零に近い正数aと1に近いbを選んで，とりあえず柏木君のプログラムで$a \leq x \leq b$の範囲のすべての解を求めてみてくれる？”と中途半端な指示をした．中谷君は意味のわからない方程式を与えられてとまどいながらも早速コンピュータにかけて解き始めた．“この分ならすぐに解は求まるな”とまじめに仕事をする中谷君をみて期待する．ところが，いつまでたっても解けましたといってこない．2か月くらいたったので聞いてみると“問題が難しいせいか領域の分割が進んでしまい，メモリオーバになって答えが出ません”という．柏木君のプログラムは考えている領域を小さく区切っていき，その中に解があるかないかを判定するのが基本となっている．判定がつかないときには更に領域を小さく分割して，解があるかないか判定する．柏木君はこれが適当な条件の下では無限に続くことはなく，有限回で終了することを証明した．しかし，今の場合，無限ではないにしても，分割がどんどん進んで，最新鋭のワークステーションでも解けない程だという．“じゃあ，仕方ないから，一つでもいいから解を精度保証付き数値計算で求めてみて”となおさら弱気な指示をする．それから1か月，まじめに取り組んだ中谷君．でも，報告は“先生，近似解すら求まりません，ニュートン法をかけようにも，そのニュートン法が収束するような初期値がどうしても見つかりません．問題のかたちがすごく悪いみたいです．”という答えが返ってきた．そうか，そんなに苦労してもだめか，“じゃあ，卒論生の遠藤さんを加勢するから2人でやってみなさい．”と得意の人海戦術にでる．これだけでは，さすがに気が引けるので，一番変数の少ない2相平衡の問題に焦点を絞り，その問題から得られる3元連立非線形方程式の変数の一つを消去し，2元連立の問題に書き換え，二つのグラフをMathematicaで描いて交点の位置（解）を目の子で見つけてみなさいと指示を出す．もう，夏休みに入っていた．就職担当の仕事も一段落したこともあり，また，学生がそんなに難しいというのなら自分でやってみようという意欲もわいてきたこともあって，家にこもって，ワークステーションで解き始めた．グラフを書いてみると，二つのグラフが解のありそうな領域の近く（これが結構広い範囲）でほぼ，ぴたっと一致してしまう．これは，いわば平行に近い2直線の交点を求めているような，悪条件の問題だとすぐにわかる．しかも，非線形関数が入っているから，二つのグラフが微妙にうねるといくつでも解はあり得る．ニュートン法をこれぞと思う初期値からスタートさせても全然収束しない．多分，収束領域がものすごく狭くて，近似値を20けたくらい真の解と一致させないと収束しないのではないか．もしかしたら，特異解があるかもしれない．これは難しい問題だ．ようやく土橋先生のおっしゃられていることが具体的にわかった．本腰を入れないと解けないぞ．と思うと同時に楽しみになってきた．戦略を練らないと解けないので，やみくもにやるのはやめにして，夏休みは微分方程式のホモクリニック分岐点の精度保証付き数値計算という，解法は作ったが時間がなくて数値計算ができなかった，問題を解くのに当てた．

3. 戦略とのめぐり合い

こうして夏休みが明け，中谷君と遠藤さんがMathematicaで出した図をもってきた（目次口絵右）．図を少し見ただけでは，どこに二つのグラフの交点があるかわからない．それ程の悪条件問題であるが，この図を拡大して子細に眺めてみると三つの異なった解があるようである．そこでクラフチック作用素を利用して精度保証付き数値計算によってその三つの解の存在検証をしてもらったところ成功した．この辺の議論の基礎となるクラフチック作用素については講座“非線形現象の解析手法”（2，3月号）

に書いたので興味をもたれた読者は参照されたい．では，それ以外に解がないことをどうやっていうか．Mathematicaで書かせたグラフは誤差があり，少しうねれば新しい解が存在してもおかしくないので，このグラフで証明することはできない．従来の方法で解がない領域を示そうとしても，領域が開であることと，これに目をつぶってもメモリ不足となってしまうので，新しいアイデアが必要である．

このようなとき九州大学で非線形問題研究会が開催された．そこで，山村先生の講演を伺った．山村先生は精度保証付きではないが，非線形方程式のすべての解を効率的に求めることに執念を燃やしておられて，Yamamura's testと世界でよばれる大変効率的な手法を編み出しておられる．このときの講演では，本論以外に，付録として原稿1枚分，講演時間で3分，線形計画法を利用して解のない領域を見い出す手法の提案があった．これを伺って電撃のような衝撃を受けた．これはすごい．これこそ求めていた手法だ．この山村の手法を使えば$y=\log x$というスラック変数yを導入し，xの定義域を分割し，例えば$[a,b]$という領域を考えると$\log a \leq y \leq \log b$という制約条件となる．こうして元の問題の非線形項をすべてスラック変数に置き換えて得られる線形不等式の解の存在，非存在は線形計画問題のフェーズⅠで判定できる．もし，この線形計画問題に解がないときには，元の非線形方程式にも解はないことがいえる．また，更に，$a=0$のときには$\log a \leq y \leq \log b$という条件は$\log 0=-\infty$となることから$y \leq \log b$という条件になるだけである．すなわち，領域が開であることもこの手法で克服できる．

早速，出張から帰って，中谷君と遠藤さんに山村の方法を伝授して，解がないことの検出に山村の方法を加えた，新しいすべての解を求めるプログラムを作ってもらうことにした．中谷君は非線形関数のグラフを凸領域で囲むという新しいアイデアを加えて山村の方法を効率化し，全解探索にとりかかった．山村の方法を利用すると，従来は無理であった開領域が取り扱える．それだけではなく，かなり大きな領域に解がないこともわかる．こうしてメモリオーバをようやく回避できるようになった．それでも，解の近くでは分割がかなり進む．これは，解の近くでクラフチック作用素が縮小写像となる領域が10^{-17}以下の狭い領域になることや，解の条件数が10^{20}程度になることが後で判明したことからも必然的であった．

中谷君と遠藤さんは晩秋からの4か月この問題に打ち込み，1996年の2月になってようやく，三つの解の存在とそれ以外には解がないことの証明に成功した．このことを書いた遠藤さんの卒論の最後は次のような言葉で結ばれている．“困難は多々あったが，正しい全解を得ることができて非常に満足している．”

遠藤さんに卒論作成で何が一番苦しかったか聞いたところ，山村の方法のアイデアはもらったが，これで果たして全解探索が成功するかどうか保証がないまま，何か月も作業しなくてはいけなかったところ，ということであった．できるか，できないかわからないことを最初にやることは，非常に大変なことであることがまたまた実感された．

本稿では人名を出させて頂いた．それらの人々から筆者は多くの勉強をさせて頂いた．深く感謝申し上げる．

大石（おおいし）　進一（しんいち）（正員）
昭28-05浜松市に生まれる．昭51-03早大・理工・通信卒．昭56-03同大学院博士後期課程了．工博．昭55-04より早大・理工勤務．現在，情報学科教授．平3年度および6年度論文賞，平6年度猪瀬賞各受賞．精度保証付き数値計算に興味をもつ．現在，編集特別幹事．