《講　座》

精度保証付きシミュレーション［3］
—常微分方程式の精度保証—

神澤雄智*・相馬隆郎**

ABSTRACT Two numerical methods are introduced to prove the existence of the solution of ordinary differential equations and to guarantee the accuracy for a given approximate solution. One is based on Taylor expansion method, which is one of single step methods for initial value problems. The other is based on Newton method on functional spaces.

1. まえがき

今回は常微分方程式の解の精度保証付き数値計算について述べる．数値計算による微分方程式の求解の難しさは，数値計算が数値演算を重ねることによって何らかの数値結果を得るのに対して，解が関数であることにある．解が $\sin(t)$ である何らかの微分方程式に対する数値計算の末，"解は $\sin(t)$ である" という結果を導き出すことは難しい．そこで，解を $x(t)$ としたときに，$t_1, t_2, \cdots, t_n$ の有限個の点における $x(t)$ の値 $x(t_1)$，$x(t_2)$，…，$x(t_n)$ を求めようとしたり，解 $x(t)$ が $t^k(k\in\{0, 1, \cdots, n\})$ や $\exp(\sqrt{-1}\,kwt)\,(k\in\{-n, -n+1, \cdots, n-1, n\})$ などの有限個の関数の1次結合で表されると仮定してその係数を求めようとすることになる．しかし，解 $x(t)$ とは無限にある t における $x(t)$ の値であり，それが有限個の関数の一次結合で表されることは稀であり，どうしても無理が生じる．この無理は，数値計算によって得られた結果に離散化誤差として入り込む．常微分方程式の解の精度保証は，この離散化誤差をどう評価するかに懸ってくる．もちろん前回までの解説の様に，通常の数値計算で用いられる浮動小数点演算を用いれば丸め誤差が混入し，反復法を用いれば打ち切り誤差も混入する．

常微分方程式の解の精度保証に関する研究は元々数値解析における誤差解析の主要なテーマの一つであり，その歴史は長い．特に，1940年代に *Kantorovich* は Newton 法に対する収束定理と誤差評価を提案した．また日本では *Urabe* が1960年代に Newton–Kantorovich の定理を数値的に確認する方法を提案している[1]．さらに，区間解析と絡めてからその発展は著しく，Moore–Shen, Lohner などは初期値問題の近似解法の一つである，Taylor 展開法を基にした精度保証付き数値計算法を提案した[2,3]．また，Kaucher–Miranker は，精度を保証しながら桁の爆発を抑える機械区間演算と同様に，関数がある基底の一次結合で表されているときに，精度を保証しながら，基底の数を抑える Ultra Arithmetic を提案した[4~6]．また，*Oishi* は，有限次元非線形方程式の解の精度保証付き数値計算法として有名な *Krawczyk* の方法を関数空間に拡張し，非線形常微分方程式の解の精度保証付き数値計算法を提案した[7]．

本文ではその全てを述べる訳にはいかないので，初期値問題，境界値問題それぞれに対する基礎的な方法を一つづつ紹介する．

2. 初期値問題

非線形常微分方程式の初期値問題

$$\frac{dx(t)}{dt}=f(x(t)),\quad x(t_0)=x^{(0)} \tag{1}$$

を考える．ここで，$x(t)$ および $f(x(t))$ は n 次元ベクトル値関数である．これは自励系だが，非自励系

$$\frac{dx(t)}{dt}=f(x(t),t),\quad x(t_0)=x^{(0)} \tag{2}$$

Simulation with Guaranteed Accuracy [III]–Numerical Method with Guaranteed Accuracy for ODEs–. By *Yuchi kanzawa* (Dept. of Electrical Communication, Faculty of Engineering, Shibaura Institute of Technology) and *Takao Soma* (Dept. of Management and Information, Tokyo Metropolitan College).
*芝浦工業大学工学部通信工学科
**東京都立短期大学経営情報学科

もまた，$\dfrac{dx_{n+1}(t)}{dt}=1$, $x_{n+1}(t_0)=t_0$ なる方程式を元の方程式に追加することによって，自励系と考えることができる．

常微分方程式の初期値問題の近似解法は数多く提案されているが，最も基礎的な方法の一つに Taylor 展開法がある．

2.1 Taylor 展開法

$x(t)$ が t_0 の周りで P 階微分可能ならば Taylor の公式より

$$
\begin{aligned}
x(t_0+h)=x(t_0)+\sum_{k=1}^{p}\left.\frac{\mathrm{d}^k x(t)}{\mathrm{d}t^k}\right|_{t=t_0}\frac{h^k}{k!}\\
+\left(\left.\frac{\mathrm{d}^{p+1}x_1(t)}{\mathrm{d}t^{p+1}}\right|_{t=\xi_1}\frac{h^{p+1}}{(p+1)!},\left.\frac{\mathrm{d}^{p+1}x_2(t)}{\mathrm{d}t^{p+1}}\right|_{t=\xi_2}\right.\\
\left.\times\frac{h^{p+1}}{(p+1)!},\cdots,\left|\frac{\mathrm{d}^{p+1}x_n(t)}{\mathrm{d}t^{p+1}}\right|_{t=\xi_n}\frac{h^{p+1}}{(p+1)!}\right)^{\mathrm{tr}}
\end{aligned}
\tag{3}
$$

と表される．ただし，$(\cdots)^{\mathrm{tr}}$ は転置を表す．剰余項における t の値は一般に x_m ごとに異なるため，最終項を成分ごとに表した．式(3)の右辺最終項を無視し，$(t_0, x(t_0))$ から，t_0+h における $x(t_0+h)$ を

$$
x(t_0+h)\simeq x(t_0)+\sum_{k=1}^{p}\left.\frac{\mathrm{d}^k x(t)}{\mathrm{d}t^k}\right|_{t=t_0}\frac{h^k}{k!}
\tag{4}
$$

によって求めるのが p 次の Taylor 展開法である．式(4)の右辺を，$x(t_0+h)$ の近似であると言う意味をこめて $\tilde{x}(t_0+h)$ と表すことにする．実際には，

$$
\tilde{x}(t_0)=x(t_0)
\tag{5}
$$

$$
\begin{aligned}
\tilde{x}(t_0+(l+1)h)=\tilde{x}(t_0+lh)+\sum_{k=1}^{p}\left.\frac{\mathrm{d}^k x(t)}{\mathrm{d}t^k}\right|_{l=t_0+lh}\\
\times\frac{h^k}{k!}\quad(l\in\{1, 2, \cdots\})
\end{aligned}
\tag{6}
$$

によって次々と $\tilde{x}(t_0+lh)$ を求めていく．常微分方程式の初期値問題の数値解法の内，1段法と呼ばれるものは，この Taylor 展開法を基礎としている．

2.2 Talor 展開法の計算

p 次の Taylor 展開法の具体的な計算のためには，

$$
h, p, \left.\frac{\mathrm{d}^k x(t)}{\mathrm{d}t^k}\right|_{t=t_0}:(k\in\{1, 2, \cdots, p\})
$$

が必要である．h, p は勝手に決めれば良い．

$$
\left.\frac{\mathrm{d}^k x(t)}{\mathrm{d}t^k}\right|_{t=t_0}:(k\in\{1, 2, \cdots, p\})
$$

を数値的に求めることはそう簡単ではない．ここでは，自動微分法と同様の技術を用いて，

$$
\left.\frac{\mathrm{d}^k x(t)}{\mathrm{d}t^k}\right|_{t=t_0}:(k\in\{1, 2, \cdots, p\})
$$

を計算する方法を紹介する．スカラー値関数 $x_1(t)$, $x_2(t)$ がそれぞれ

$$
x_1(t)=\sum_{j=0}^{\infty}a_j(t-t_0)^j,
\tag{7}
$$

$$
x_2(t)=\sum_{j=0}^{\infty}b_j(t-t_0)^j
\tag{8}
$$

と表されているとする．このとき，**表1**の第一コラムにある基本演算によって得られる結果 $z(t)$ の $(t-t_0)^j$ の係数 c_j は表1の第二コラムのようになる．

さて今，方程式(1)と等価な積分方程式

$$
x(t)=x(t_0)+\int_{t_0}^{t}f(x(t))\,\mathrm{d}t
\tag{9}
$$

を考える．$x(t)$ が形式的に t_0 の周りで巾級数展開されているとして，

$$
x(t)=\sum_{j=0}^{\infty}(a_j(t-t_0)^j)
\tag{10}
$$

とする．この内，$a_j:(j\in\{0, 1, 2, \cdots, k\})$ まで既知であるとする．このとき，表1を見ながら f の計算過程を追うことによって $f(x(t))$ の t_0 の周りで展開した巾級数

$$
f(x(t))=\sum_{j=0}^{\infty}(b_j(t-t_0)^j)
\tag{11}
$$

の第 j 項目の係数 b_j を得ることができる．式(9)の右辺の通り，この第 k 項目 b_jt^j を t_0 から t まで積分した

表1　基本演算とその巾級数の第 k 項目の係数

基本演算 Ψ	その巾級数の第 j 項目の係数
$z(t)=x(t)\pm y(t)$	$c_j=a_j+b_j$
$z(t)=\alpha x(t)$	$c_j=\alpha a_j$
$z(t)=x(t)\times y(t)$	$c_j=\sum_{i=0}^{j}a_ib_{j-i}$
$z(t)=\dfrac{x(t)}{y(t)}$	$c_0=\dfrac{a_0}{b_0}$ $c_j=\dfrac{1}{b_0}\left(a_j-\sum_{i=0}^{j-1}c_jb_{j-i}\right)\quad(j\neq 0)$
$z(t)=\exp(x(t))$	$c_0=\exp(a_0)$ $c_j=\dfrac{1}{j}\left(\sum_{i=1}^{j}ia_ic_{j-i}\right)\quad(j\neq 0)$
$z(t)=\log(x(t))$	$c_0=\log(a_0)$ $c_j=\dfrac{1}{ja_0}\left(ja_j-\sum_{i=1}^{j-1}(ic_ia_{j-i})\right)\quad(j\neq 0)$
$z(t)=\sqrt{x(t)}$	$c_0=\sqrt{a_0}$ $c_j=\dfrac{1}{2c_0}\left(a_j-\sum_{i=1}^{j-1}(c_ic_{j-i})\right)\quad(j\neq 0)$
$z(t)=\sin(x(t))$ $w(t)=\cos(x(t))$	$c_0=\sin(c_0)$ $d_0=\cos(c_0)$ $c_j=\dfrac{1}{j}\left(\sum_{i=1}^{j}(ia_0d_{j-i})\right)\quad(j\neq 0)$ $d_j=-\dfrac{1}{j}\left(\sum_{i=1}^{j}(ia_0c_{k-i})\right)\quad(j\neq 0)$

ものは$\frac{b_k}{k+1}(t-t_0)^{k+1}$となり，この項目以外の$t-t_0$の次数は$k+1$ではない．したがって，$x(t)$の第$k+1$項目の係数$a_{k+1}$は$\frac{b_k}{k+1}$に等しい．こうして，$a_j$：$(j\in\{0, 1, 2, \cdots, k\}$ からb_j：$(j\in\{0, 1, 2, \cdots, k\}$ を通してa_{k+1}を得ることができる．a_0は$x(t_0)$に等しく，$x(t_0)$は問題中に与えられているから，a_0から任意の数pまでa_j：$(j\in\{0, 1, 2, \cdots, p\}$ を得ることができる．

関数や演算子の多重定義ができれば，fの計算過程だけから比較的簡単に計算機上で自動的に上の計算を行うことができる．

2.3 Taylor 展開法を基にした精度保証付き数値計算

さて，前置きが長くなったが，本文は精度保証付き数値計算の話であり，上のように計算できただけでは意味がない．まずは局所打ち切り誤差$x(t_0+h)-\tilde{x}(t_0+h)$を評価したい．式(3)，(4)より局所打ち切り誤差は

$$\begin{aligned}
&x(t_0+h)-\tilde{x}(t_0+h)\\
&=\left(\left.\frac{d^{p+1}x_1(t)}{dt^{p+1}}\right|_{t=\xi_1}\frac{h^{p+1}}{(p+1)!}, \left.\frac{d^{p+1}x_2(t)}{dt^{p+1}}\right|_{t=\xi_2}\right.\\
&\quad\left.\times\frac{h^{p+1}}{(p+1)!}, \cdots, \left.\frac{d^{p+1}x_n(t)}{dt^{p+1}}\right|_{t=\xi_n}\frac{h^{p+1}}{(p+1)!}\right)^{\mathrm{tr}}\\
&=\left(\left.\frac{d^{p}f_1(x(t))}{dt^{p}}\right|_{t=\xi_1}\frac{h^{p+1}}{(p+1)!}, \left.\frac{d^{p}f_2(x(t))}{dt^{p}}\right|_{t=\xi_2}\right.\\
&\quad\left.\times\frac{h^{p+1}}{(p+1)!}, \cdots, \left.\frac{d^{p}f_n(x(t))}{dt^{p}}\right|_{t=\xi_2}\frac{h^{p+1}}{(p+1)!}\right)^{\mathrm{tr}}\\
&\qquad(\xi_m\in[t_0, t_0+h], m\in\{1, 2, \cdots, n\}) \qquad (12)
\end{aligned}$$

と表される．しかし$x_m(\xi_m)$の値が不明である以上，式(12)の値は分からない．$x_m(\xi_m)$は$[t_0, t_0+h]$内の1点ξ_mにおける$x_m(t)$の値であり，今まさに，t_0より大きい値での$x(t)$を求めようとしているのだから，$x_m(\xi_m)$が分かるはずはない．そこで，大雑把に（“いい加減に”ではない）$\{x(t)\,|\,t\in[t_0, t_0+h]\}$を見積もる．

まず，元の方程式(1)を等価な積分方程式に変換する：

$$x(t)=x^{(0)}+\int_{t_0}^{t}f(x)\,dt. \qquad (13)$$

$x(t)$のある有界閉凸集合Uに関して，

$$\left\{x^{(0)}+\int_{t_0}^{t_0+t}f(x(t))\,dt\,|\,x(t)\in U\right\}\subset U \qquad (14)$$

が成立すれば，Schauder の縮小写像の定理より，集合U内に方程式(1)の解が唯一存在する．これを数値的に確かめたい．そこで区間値関数を導入する．関数Xの定義域内の各tに対して，関数値$X(t)$が区間であるような関数Xを区間値関数ということにする．前回までの解説にある区間写像とは異なることに注意してほしい．$x\in\boldsymbol{R}^n$を$[x, x]$なる区間とみなせば，いわゆる関数$x(t)$もまた一種の区間値関数である．区間$[x_a, x_b]$：$x_a, x_b\in\boldsymbol{R}$に対して，$x_a$, x_bをそれぞれ下端，上端というが，これと同様に，定義域内の各tに対して，区間値関数$X(t)$の下端を対応づける関数を下端関数といい，$\overline{X}(t)$で表す．上端関数も同様に定義し，$\underline{X}(t)$で表す．また，定義域内の各tに対して，関数値$X(t)$がn次元区間ベクトルであるような関数Xをn次元区間ベクトル値関数ということにする．

$x_{ak}, x_{bk}\in\boldsymbol{R}$：$(k\in\{1, 2, \cdots, n\})$に対して，$n$次元区間ベクトル $([x_{a1}, x_{b1}], [x_{a2}, x_{b2}], \cdots, [x_{an}, x_{bn}])^{\mathrm{tr}}$もまた，すべての$t$に対して，同じ区間を対応づける$n$次元区間ベクトル値関数である．ここで注意すべきは，この関数が定数関数の集合ではないことである．ここではこのような区間値関数に限って用いる．

今，

$$B=([-e_1, +e_1], [-e_2, +e_2], \cdots, [-e_1, +e_1])^{\mathrm{tr}}, \qquad (15)$$

$$X_0=x^{(0)}+B \qquad (16)$$

とすると，

$$\{f(x(t))\,|\,x\in X_0\}\subset X_1 \qquad (17)$$

なる関数集合X_1は，fの計算過程にしたがって区間演算を行うことによって得られる区間拡張$f(X_0)$を計算することによって得られる（もちろん，平均値形式など他の集合演算を用いても良い）．すなわち，

$$X_1=f(X_0). \qquad (18)$$

積分の性質より，

$$\begin{aligned}
\int_{t_0}^{t_0+h}X_1\,dt&\subset\left[\int_{t_0}^{t_0+h}\underline{X_1}\,dt, \int_{t_0}^{t_0+h}\overline{X_1}\,dt\right]\\
&\subset[\underline{X_1}h, \overline{X_1}h] \qquad (19)
\end{aligned}$$

である．したがって，条件(14)を確かめるためには，

$$[\underline{X_1}h, \overline{X_1}h]\subset B \qquad (20)$$

すなわち，

$$\overline{B}<h\overline{X_1}, \qquad (21)$$

$$h\underline{X_1}<\underline{B} \qquad (22)$$

を確かめれば良い．

今，条件(21)，(22)が成立しているとすると，X_0内に方程式(1)の解$x(t)$を含んでいる．この各成分は勿論，$(x_1(\xi_1), x_2(\xi_2), \cdots, x_n(\xi_n))^{\mathrm{tr}}$も含んでいるから，

$$\left(\frac{1}{(p+1)!}\left.\frac{d^{p+1}x_1(t)}{dt^{p+1}}\right|_{t=\xi_1}\frac{1}{(p+1)!}\left.\frac{d^{p+1}x_2(t)}{dt^{p+1}}\right|_{t=\xi_2}\cdots,\right.$$

$$\frac{1}{(p+1)!}\frac{\mathrm{d}^{p+1}x_n(t)}{\mathrm{d}t^{p+1}}\bigg|_{t=\xi_n}\Bigg)^{\mathrm{tr}}\in\frac{1}{(p+1)!}\frac{\mathrm{d}^p f(x)}{\mathrm{d}t^p}\bigg|_{x=X_0} \tag{23}$$

が成立し，式(4)と合わせ，t_0+h における方程式(1)の解 $x(t_0+h)$ は

$$x(t_0+h)\in x(t_0)+h\sum_{k=0}^{p-1}\frac{h^k}{(k+1)!}\frac{\mathrm{d}^k f(x(t))}{\mathrm{d}t^k}\bigg|_{t=t_0}+\frac{h^{p+1}}{(p+1)!}\frac{\mathrm{d}^p f(x)}{\mathrm{d}t^p}\bigg|_{x=X_0} \tag{24}$$

内に存在する．

$$\frac{1}{(p+1)!}\frac{\mathrm{d}^p f(x)}{\mathrm{d}t^p}\bigg|_{x=X_0}$$

は，f の計算過程に対する入力変数 x を X_0 として，前項で述べた

$$\frac{1}{k!}\frac{\mathrm{d}^{k-1}f(x)}{\mathrm{d}t^{k-1}}\bigg|_{x=x_0}$$

の計算法を区間演算を用いて行うことによって得られる．

ここまで丸め誤差に関しては何の議論もしていないが，上で述べた演算を機械区間演算で行うことにより，丸め誤差をも考慮した評価を行うことができる．

式(24)は，$x(t_0+h)$ の存在範囲を示しているが，式(20)が成立しているとき，$0\leqq t\leqq h$ なる t においても式(20)が成立しているので，X_0 は $t_0\leqq t\leqq t_0+h$ なるすべての t における $x(t)$ を含んでいる．よって，区間演算の性質から

$$\frac{1}{(p+1)!}\frac{\mathrm{d}^p f(x)}{\mathrm{d}t^p}\bigg|_{x=X_0}$$

は，$t_0\leqq t\leqq t_0+h$ なるすべての t における

$$\frac{1}{(p+1)!}\frac{\mathrm{d}^p f(x)}{\mathrm{d}t^p}\bigg|_{x=X_0}$$

を含んでいる．したがって，式(24)右辺の h を t に置き換えた

$$x(t_0)+t\sum_{k=0}^{p-1}\frac{t^k}{(k+1)!}\frac{\mathrm{d}^k f(x(t))}{\mathrm{d}t^k}\bigg|_{t=t_0}+\frac{t^{p+1}}{(p+1)!}\frac{\mathrm{d}^p f(x)}{\mathrm{d}t^p}\bigg|_{x=X_0} \tag{25}$$

は，$t_0\leqq t\leqq t_0+h$ なるすべての t における $x(t)$ を含んでいる．

今まで説明してきた手法は，一段法の第一ステップに対応する．t_0+h よりも大きい t に対する $x(t)$ の精度保証を行うには，第一ステップで得た区間(24)を初期値（区間）$x^{(0)}$ にして，同様の計算を行えば良い．

しかし，このようにステップを重ねていくと，最終的に得られる区間幅は悲観的なまでに大きく膨らむのが一般的である．平均値形式や他の手法を用いてこの区間幅の爆発を抑える手法も提案されている[9,3]．

3. 境界値問題

本章では，非線形常微分方程式の境界値問題

$$\frac{dx}{dt}=f(x,t),\quad t\in[-1,1]$$
$$g(x)=0 \tag{26}$$

を考える．ただし，x は n 次元ベクトル，$f(x,t)$ は n 次元ベクトル値関数，g は境界条件を表す n 次元ベクトル値汎関数である．例えば多点境界値問題の場合，$-1=t_0<t_1<t_2<\cdots<t_{N-1}<t_N=1$ とすると g は

$$g(x)=\sum_{i=0}^{N}B_i x(t_i)-b \tag{27}$$

のように表現できる．ここで $B_i(i=0,1,2,\cdots,N)$ は $n\times n$ 行列，b は n 次元定ベクトルとする．以下 Oishi[7] の方法を紹介する．

$X=C([-1,1];R^n)$ で区間 $[-1,1]$ 上で連続な実 n 次元ベクトル値関数 $x(t)=(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ の作るバナッハ空間を表すとする，ノルムは以下に示すスケーリング最大値ノルム

$$\|x\|_u=\sup_{t\in[-1,1]}|x(t)|_u \tag{28}$$

で与える．ただし

$$|x|_u=\max_{1\leqq i\leqq n}\frac{|x_i(t)|}{u_i} \tag{29}$$

$$u=(u_1,\cdots,u_n)\in R^n,\ u>0 \tag{30}$$

とする．また，$Y=X\times R^n$ とする．$D=C^1([-1,1];R^n)$ を実 n 次元ベクトル値関数 $x(t)=(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ で $x\in C([-1,1];R^n)$ かつ $dx/dt\in C([-1,1];R^n)$ となるもののつくるバナッハ空間とする．

ここで，作用素 $F:D\subset X\to Y$ を以下のように定義し，(26)式を作用素方程式で表現する．

$$F(x)=\left(\frac{dx}{dt}-f(x,t),g(x)\right)=0 \tag{31}$$

ただし，$f:X\to X,\ g:X\to R^n$ は x で Fréchet 微分可能とする．このとき F は x について Fréchet 微分可能で $DF(x):D\subset X\to Y$ は

$$DF(x)h=\left(\frac{dh}{dt}-f_x(x,t)h,\ Dg(x)h\right) \tag{32}$$

となる．ただし，$h\in D$, $f_x(x,t)$ は f の x に対するヤコビ行列，$Dg(x)$ は g の Fréchet 導関数とする．ここで，(31)式の近似解 $c(t)$ が得られたとする．このとき $f_x(c,t)$ と $Dg(c)$ の近似として，区間 $[-1,1]$ 上

で連続な実行列値関数 $A(t)$ とベクトル値線形汎関数 l を用いると，$DF(c)$ の近似として線形作用素 L は

$$Lh=\left(\frac{dh}{dt}-A(t)h,\ lh\right) \tag{33}$$

と定義できる．さらに，以下の線形斉次形の基本解行列を $\Phi(t)$ とする．

$$\frac{dz}{dt}=A(t)z \tag{34}$$

$$\Phi(-1)=I \tag{35}$$

このとき，L の逆作用素 L^{-1} は次で与えられることが，*Urabe* によって示されている．

まず，$\phi_i(t)\ (i=1, 2, \cdots, n)$ を $\Phi(t)$ の i 番目の列ベクトルとし，$G=l[\Phi(t)]$ を列ベクトル $l[\phi_i(t)]$ で構成された行列とする．G が正則であるならば，L^{-1} は

$$L^{-1}(\zeta, \eta)=(I-\Phi(t)G^{-1}l)\Phi(t)\int_{-1}^{t}\Phi^{-1}(s)\zeta(s) \times ds+\Phi(t)G^{-1}\eta \tag{36}$$

と表される．

この L^{-1} を用いて Newton 作用素 $k: X\rightarrow X$ は

$$\begin{aligned} k(x)&=L^{-1}(L-F)x \\ &=L^{-1}(f(x, t)-A(t)x,\ l(x)-g(x)) \end{aligned} \tag{37}$$

で定義される．Newton 作用素の定義として上式を用いれば，dx/dt が打ち消されてなくなっているため，微分不可能な点を持つ近似解に対しても Newton 法を適用することができる．

次に k の不動点の存在を検証するために Krawczyk 作用素を導入する．近似解 $c(t)$ を中心とする区間値関数 $T(t)$ を入力したときの Krawczyk 作用素は

$$K(T)=k(c)+M(T-c) \tag{38}$$

で定義される．ただし

$$\begin{aligned} M&=L^{-1}(L-DF(T)) \\ &=L^{-1}(f_x(T, t)-A(t),\ l-Dg(T)) \end{aligned} \tag{39}$$

である．

ここで，前々回に紹介した有限次元非線形方程式に対する *Krawzcyk* の方法と同様の定理が成立する．

定理3. 1[7]　$T(t)$ を有界な区間値関数とする．もし

$$K(T(t))\subset T(t) \tag{40}$$

$$||M||_u<1 \tag{41}$$

の両式が成立するならば，Newton 作用素 k の不動点 x^* が $T(t)\subset X$ 内に唯一存在する．さらに，この x^* は D に属し，$Fx^*=0$ を満たす孤立解である．

この定理では，Newton 作用素 k の不動点 $x^*\in X$ は実は微分可能であり，もとの微分方程式(26)の解となっていることが示されている．

では，実際に近似解 $c(t)$ が与えられたとき，区間値関数 $T(t)$ をどのように選べば良いかということを含め，真の解の存在検証を行う手順を以下のアルゴリズムに示す．

アルゴリズム3. 1[7]

step 1　$f_x(c(t), t)$ の近似関数 $\tilde{A}(t)$ を選ぶ．

step 2　次の線形斉次系の基本解行列の近似関数 $\Phi(t)$ を計算する．

$$\frac{dz}{dt}=\tilde{A}(t)z \tag{42}$$

ただし，$\Phi(-1)=I$ で区分的に滑らかな関数とする．

step 3　次の関数を計算する．

$$A(t)=\frac{d\Phi(t)}{dt} \tag{44}$$

step 4　$Dg(c)$ の近似ベクトル値線形汎関数 l を選び，つぎの定義をする．

$$Lh=\left(\frac{dh}{dt}-A(t)h,\ l(h)\right) \tag{45}$$

step 5　$G=l[\Phi(t)]$ を計算する．もし，これが特異であれば失敗．そうでなければ G^{-1} を計算する．

step 6　$L^{-1}F(c)$ の区間包囲を次によって計算する．

$$\begin{aligned} &L^{-1}F(c(t)) \\ &=-(I-\Phi(t)G^{-1}l)\Phi(t)\int_{-1}^{t}\Phi^{-1}(s)(f(c(s), s) \\ &\quad -A(s)c(s))\,ds-\Phi(t)G^{-1}(l(c)-g(c))-c(t) \end{aligned} \tag{46}$$

または，c が 1 回連続微分可能であれば

$$\begin{aligned} &L^{-1}F(c(t)) \\ &=(I-\Phi(t)G^{-1}l)\Phi(t)\int_{-1}^{t}\Phi^{-1}(s)\left(\frac{dc(s)}{ds}\right. \\ &\quad \left.-f(c(s), s)\right)ds+\Phi(t)G^{-1}g(c) \end{aligned} \tag{47}$$

を用いてもよい．$S(t)$ を計算の結果えられた $L^{-1}F(c)$ の区間包囲とする．

step 7　ρ を 1 より大きな定数とし，

$$u=\max_{-1\leqq t\leqq 1}|S(t)| \tag{48}$$

とスケーリングベクトルを選ぶ．そして

$$T(t)-c(t)=\rho[-u, u] \tag{49}$$

ととる．

step 8　$M=L^{-1}(f_x(T(t), t)-A(t),\ l-Dg(T(t)))$ とおき，次の条件を検証する．

$$L^{-1}F(c)+M(T-c)\subset T-c \tag{50}$$

$$||M||_u\leqq 1 \tag{51}$$

もし，これらの条件が成立していることが確認されれ

ば，(26)式の孤立解が $T(t)$ 内にただ一つ存在することがわかる．

step 2 において求めた基本解行列 $\Phi(t)$ は計算誤差が混入し，その誤差を把握することは困難であるため $\tilde{A}(t)$ に対して正確な基本解行列とはならない．そこで step 3 において，$\Phi(t)$ を用いて再度近似関数 $A(t)$ を精度保証付きで計算することにより，$\Phi(t)$ と $A(t)$ の関係を正確なものとしている．これにより L に対して L^{-1} が正確に求められ，Newton 作用素 k の計算が正しく行われる仕組みとなっている．

以下にアルゴリズム3.1を用いて真の解の存在検証を行った例を示す．

Van der Pol の境界値問題

$$\frac{d^2y}{dt^2}-\frac{1}{4}(1-y^2)\frac{dy}{dt}+\frac{1}{16}y=0,\quad t\in[-1,1]$$

$$y(-1)=0,\quad y(1)=2 \tag{52}$$

に対して真の解の存在検証を行う．ただし，

$$x_1=y,\quad x_2=\frac{dy}{dt} \tag{53}$$

とし，連立の1階常微分方程式

$$\begin{cases}\dfrac{dx_1}{dt}=x_2\\ \dfrac{dx_2}{dt}=\dfrac{1}{4}(1-x_1^2)x_2-\dfrac{1}{16}x_1\end{cases} \tag{54}$$

に直して計算を行った．境界条件を表す作用素 g は以下のようになる．

$$g(x)=\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1(-1)\\x_2(-1)\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1(1)\\x_2(1)\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0\\2\end{pmatrix} \tag{55}$$

また，近似解 $c(t)$ は Chebyshev 多項式で表現された

$$\begin{aligned}c_1(t)=&1.034033620+1.023980688T_1\\&-0.032794611T_2-0.024855758T_3\\&-0.001366850T_4+0.000901078T_5\\&+0.000136532T_6-0.000026443T_7\\&-0.000008690T_8+0.000000433T_9\\&+0.000000397T_{10}\end{aligned} \tag{56}$$

$$\begin{aligned}c_2(t)=&0.953737608-0.140605977T_1\\&-0.140486160T_2-0.009427530T_3\\&+0.008648387T_4+0.001507276T_5\\&-0.000362400T_6-0.000131112T_7\\&+0.000007807T_8+0.000007941T_9\end{aligned} \tag{57}$$

を用いる．ただし，$T_i(i=1,2,\cdots)$ は Chebyshev 級数の基底である．これに対して，$S(t)$ を計算し，

$$\begin{aligned}u=&\max_{-1\leqq t\leqq 1}|S(t)|\\=&(0.000000773963,0.000002377556)\end{aligned} \tag{58}$$

となった．次に区間値関数

$$T(t)=c(t)+\rho[-u,u],\ \rho=2 \tag{59}$$

に対して真の解の存在検証を行った結果，

$$\max_{-1\leqq t\leqq 1}|M(T-c)|\leqq(0.000000033491,0.000000024860) \tag{60}$$

となり，

$$\max_{-1\leqq t\leqq 1}|M(T-c)|<u \tag{61}$$

より step 8 の(50)式を満たすことが確認できる．また，$||M||_u$ を評価すると

$$||M||_u<0.11627364175 \tag{62}$$

となり，(51)式が満たされる．よって区間値関数

$$T(t)=c(t)+\{x\in X|\max_{-1\leqq t\leqq 1}|x(t)|\leqq(0.000001547926,0.000004755112\} \tag{63}$$

の中に真の解が存在することが確認できる．

さらに，ここで得られた区間値関数に対して再度 Krawczyk 作用素を適用し，反復改良を行う方法も提案されている[15]．

4. あとがき

本解説は，常微分方程式の解の精度保証付き数値計算法の中で，区間解析を使った最も基礎的な方法を二つ紹介した．一つは初期値問題の近似解法の一つである Taylor 展開法を基にした手法であり，もう一つは，関数方程式に Newton 法を適用することを基にした手法である．

これらの変種[12~14]や，これらが抱える問題を解決しようとしている多くの手法が提案され，複雑な方程式にも適用可能になりつつある．

謝辞

本解説執筆を機会を与えて下さいました，早稲田大学　大石進一先生に深謝致します．また，本文を執筆するに当り，貴重な助言を頂きました，早稲田大学柏木雅英先生に感謝致します．