計算数理工学論文集 Vol. 2 (2002 年 7 月), 論文 No. 02_070313 JASCOME

多倍長計算による非適切問題の数値解析

Numerical Analysis for Ill-Posed Problems by Multiple-Precision Arithmetic

磯　祐介 [1)]，藤原　宏志 [2)]

Yuusuke ISO, Hiroshi FUJIWARA

1) 京都大学大学院 情報学研究科　(〒 606-8501　京都市左京区吉田本町，　E-mail: iso@acs.i.kyoto-u.ac.jp)

2) 京都大学大学院 情報学研究科　(〒 606-8501　京都市左京区吉田本町，　E-mail: fujiwara@acs.i.kyoto-u.ac.jp)

We shall show the effective use of a multiple-precision arithmetic environment applied to ill-posed problems, and show numerical computations of the Cauchy problem of the Laplace equation, which is typically ill-posed. Discretization of ill-posed problems yields numerically unstable schemes, so-called ill-conditioned problems, and we cannot carry out reliable numerical computations for the scheme because of increase of rounding errors. To overcome this difficulty, we propose to use multiple-precision arithmetic and show nice numerical results.

Key Words: 非適切問題，数値解析，丸め誤差解析，多倍長計算，逆問題

1. はじめに

本研究は，微分方程式などで記述される逆問題に現われる非適切問題に対し，多倍長計算により数値解析を行うことの有効性を提案するものである．

工学や地球物理などの具体的な問題に関わる逆問題 (inverse problems) は，偏微分方程式や積分方程式で記述されることが多い．これまでの逆問題に対する数学解析による研究では，解の一意性と条件安定性がその中心的な議論であったが，特に工学に現れる逆問題が具体的な問題と密接に関係していることを考慮すると，解の再構成の数学的あるいは数値的な取り扱いこそが重要な課題であると考えられる．しかし逆問題に対して厳密解を構成することは一般に不可能であり，さらに殆んどの逆問題は Hadamard の意味で非適切であることが多く，この問題の数値解を求めるために直接的離散化によって得られる離散化問題は数値的に不安定 (ill-conditioned) になる．

我々が計算機上で数値計算を行なう際，計算機で扱われる実数は有限桁の浮動小数点システムの枠組で扱われる．今日では，IEEE754 に定められる倍精度方式が最も広く使われており，これは 10 進法で約 15 桁の精度で実数を近似し，数の表現および演算を行うものである [(4)]．このような環境下では，扱う真値と計算機上の浮動小数点数値との間には丸め誤差 (rounding error) と呼ばれる誤差が混入する．数値的に不安定な問題の数値計算では，その計算過程で丸め誤差が著しく増大して数値計算が破綻することが知られており，これ迄，逆問題や非適切問題の数値解析においては信頼できる数値計算の実行は極めて困難とされていた．

このような問題点に対し，我々は，任意の桁数で実数を近似し，表現および演算を行うことができる多倍長数値計算を適用して信頼できる数値計算を実行することを提案した．すなわち，多倍長数値計算により問題に応じて十分桁数を確保することで，丸め誤差の増大を隠蔽して仮想的に丸め誤差のない数値計算を実現しようとするものである．この方法により，我々は，数値的に不安定な問題に対しても信頼できる数値計算が実現できることを示してきた．

本論文では，典型的な非適切問題である楕円型方程式の初期値問題を例に挙げ，上記の提案に従って数値実験を行い，多倍長計算の有効性を示す．以下，§2 において問題設定を行い，この問題が非適切であることを示す．その数値計算を §3 において示す．

2. 問題設定

本研究では，次の楕円型方程式の初期値問題を扱う．

$$\Delta u(x,y) = 0 \quad y > 0, x \in \mathbb{R}, \tag{2.1a}$$

$$u(x,0) = f(x), \quad x \in \mathbb{R}, \tag{2.1b}$$

$$\frac{\partial u}{\partial y}(x,0) = g(x), \quad x \in \mathbb{R}. \tag{2.1c}$$

この問題に対し，函数 $e_n(x,y), \delta_n(x)$ を

$$e_n(x,y) := \frac{1}{n^k}\sin(nx)\exp(ny),$$

$$\delta_n(x) := e_n(x,0) = \frac{1}{n^k}\sin(nx),$$

とし，これらを用いて系 (2.1) が Hadamard の意味で非適切で

あることを示す．自然数 n と k を固定すると，函数 $e_n(x,y)$ は

$$\Delta u(x,y) = 0 \quad y > 0, x \in \mathbb{R}, \tag{2.2a}$$

$$u(x,0) = \delta_n(x), \quad x \in \mathbb{R}, \tag{2.2b}$$

$$\frac{\partial u}{\partial y}(x,0) = 0, \quad x \in \mathbb{R}, \tag{2.2c}$$

の唯一つの解であることが Cauchy-Kowalevskaya の定理からわかる．この例において，最大値ノルムで評価をした場合，初期値 δ_n については，

$$\|\delta_n\| \to 0 \quad (\text{as } n \to \infty)$$

を満たすのに対し，その厳密解 e_n は，任意の $y > 0$ に対し，

$$\|e_n(\cdot, y)\| \to \infty \quad (\text{as } n \to \infty)$$

となる．k を十分大きくすることにより，任意の位数の Sobolev ノルムでも $\|e_n(\cdot, y)\|$ は発散する．これは，問題 (2.1) で，初期値に対して解が安定でないような例が存在することを示しており，従って (2.1) は Hadamard の意味で非適切であることがわかる．

詳しく述べると，(2.1) において Neumann データは $g(x) = 0$ とし，g には誤差が混入しないものとする．また (2.1) には厳密解が唯一つ存在するとし，それを $u(x,y)$ と表す．初期値 $f(x)$ に誤差が $\delta_n(x)$ として混入することを想定してその解を $\tilde{u}_n(x,y)$ と表すと，$\tilde{u}_n(x,y)$ については

$$\Delta \tilde{u}_n = 0, \quad y > 0, x \in \mathbb{R}, \tag{2.3a}$$

$$\tilde{u}_n(x,0) = f(x) + \delta_n(x), \quad x \in \mathbb{R}, \tag{2.3b}$$

$$\frac{\partial \tilde{u}_n}{\partial y}(x,0) = 0, \quad x \in \mathbb{R}, \tag{2.3c}$$

を解くことになる．系 (2.1) が線型であることに注意すると，厳密解は

$$\tilde{u}_n(x,y) = u(x,y) + e_n(x,y),$$

となる．上で行なった考察のとおり，最大値あるいは Sobolev ノルムで評価すると，$\|\delta_n\|$ が十分小さい場合にも，$\|e_n\|$ は $\|u\|$ の値を越えていくらでも大きくなる可能性がある．数値計算上では，δ_n が混入する丸め誤差に相当し，このような場合，方程式 (2.1) を想定して行なった数値計算は破綻しており，y を固定する毎に得られる数値解 $\{\tilde{u}_h(x,y)\}$ は意味をなさない．

この丸め誤差の増大を具体的に見るため，特に次のように初期値を設定して数値計算を行なった．

$$\Delta u = 0, \quad y > 0, x \in \mathbb{R}, \tag{2.4a}$$

$$u(x,0) = x^2, \quad x \in \mathbb{R}, \tag{2.4b}$$

$$\frac{\partial u}{\partial y}(x,0) = 0, \quad x \in \mathbb{R}. \tag{2.4c}$$

この問題に対し，x, y 方向の離散化パラメータをそれぞれ $\Delta x, \Delta y$ として差分法を適用することで，次の離散化方程式が得られる．

$$\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta y^2} = 0, \tag{2.5a}$$

$$u_{i,0} = (i\Delta x)^2, \tag{2.5b}$$

$$\frac{u_{i,1} - u_{i,0}}{\Delta x} = 0. \tag{2.5c}$$

この離散化方程式 (2.5) が数値的に不安定になることは既に示したが，一方で，解析函数のクラスでは，$u_{i,j} \to u$ の収束性は数学的に示されている．すなわち，(2.5) の厳密解は，$\Delta x \to 0$ かつ $\Delta y \to 0$ のとき，問題 (2.4) の解に，原点のある近傍で広義一様収束する [3]．

通常このような非適切問題に対しては，正則化法などの数学的な安定化手法を適用し，安定化された問題に対して数値計算が行われる．本研究で考察している楕円型の初期値問題に対しては，Lattès および Lions らによる Quasi-Reversibility[5] などが知られている．しかしこのような安定化手法には，非適切問題を緩和させるために正則化パラメータと呼ばれる値が現われ，その値を適切に選択する必要がある．これは離散化の際の分割数や，解の情報など問題の設定に応じて適切に決定する必要がある．一方，Hansen らにより L-curve を用いた手法などが提案されてきたが [2]，我々は一般にこの手法は適当ではないと考えている [1]．実際の数値計算においては経験的に正則化パラメータの値を選択することが多く，その結果の正当性を数学的に保証することは多くの場合，困難であるという欠点がある．

3. 数値計算例

本節では，前節で設定した問題 (2.5) に対する数値計算結果を示す．なお，ここで用いた多倍長数値計算環境は，著者の一人によって構築された高速の多倍長環境である [6]．

まず，離散化パラメータを $\Delta x = \Delta y = 0.02$ と設定したとき，$y = 0.44$ における数値解を倍精度計算環境で求めた結果を図 1 に示す．図では，厳密解を実線で，数値計算で得られた値を $\diamond$ で示している．(以下，図中の記号は全て同様である．) 図より明らかなように，倍精度環境では丸め誤差の増大により数値計算が破綻していることがわかる．同じ離散化パラメータの下で多倍長数値計算環境により，10 進で 100 桁を確保して行った数値計算の結果を図 2 に示す．多倍長計算により，厳密解を十分近似する数値解を得られていることがわかる．

次に，より小さな離散化パラメータを設定して数値計算を行った．$\Delta x = \Delta y = 0.01$ とし，$y = 0.22$ における数値解を倍精度環境で求めた結果を図 3 に示す．離散化パラメータの減少に伴う，数値解の収束性を見ることはできない．一方，多倍長計算環境下で 100 桁を設定して数値計算を行なったところ，図 4 に示す数値解が得られた．この例も図 2 の場合と同様に，丸め誤差の影響が現れることなく数値計算が成功していることがわかる．これらの結果から，数値的に不安定な問題の数値計算において丸め誤差の影響を隠蔽するには，

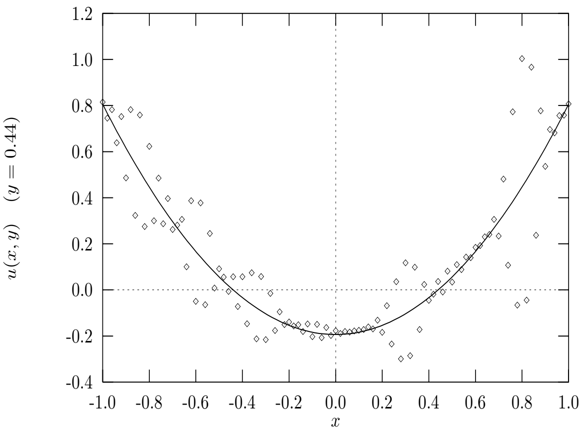

図 1. 倍精度での結果 $(\Delta x = \Delta y = 0.02, y = 0.44)$

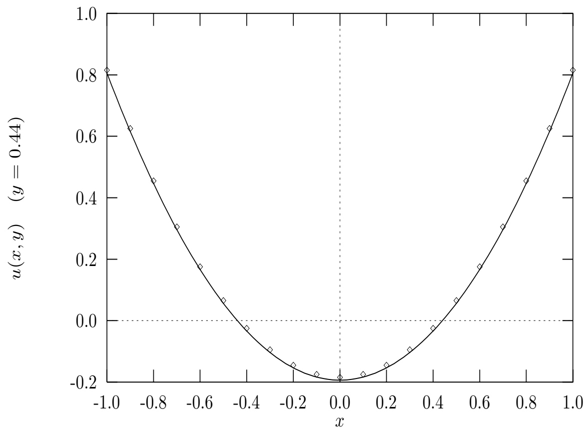

図 2. 100 桁での結果 $(\Delta x = \Delta y = 0.02, y = 0.44)$

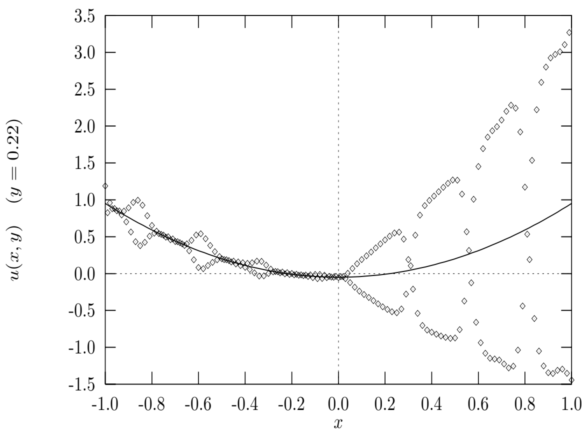

図 3. 倍精度での結果 $(\Delta x = \Delta y = 0.01, y = 0.22)$

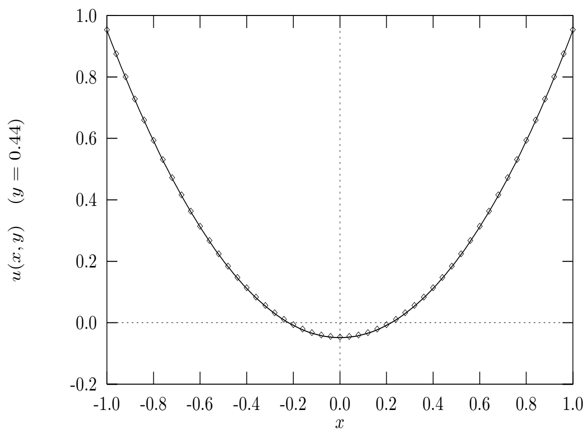

図 4. 100 桁での結果 $(\Delta x = \Delta y = 0.01, y = 0.22)$

多倍長計算が有効であることがわかる．

しかし多倍長計算環境は，あくまで丸め誤差の増大の影響を隠蔽しているに過ぎず，数値的な不安定性を本質的に解決しているわけではない．例えば，離散化パラメータを $\Delta x = \Delta y = 0.005$ とし，100 桁によって $y = 0.515$ での数値解を求める．その結果は図 5 に示すとおり，丸め誤差の影響と考えられる数値解の振動が現われる．これは，離散化パラメータ $\Delta x = \Delta y = 0.005$，そして y の値 $y = 0.515$ に対しては 100 桁では不十分であることを意味している．一方，120 桁を確保して数値計算を行うと図 6 に示す数値解が得られる．これらの結果は，信頼できる数値計算を実行するために必要と思われる計算桁数は，問題に依存して確保される必要があることを示している．

4. 結言

これまで非適切問題の直接的な離散化問題は，その数値的な不安定性により数値解の構成は不可能であるとされてきた．しかし，多倍長数値計算によって丸め誤差の影響を隠蔽することで，不安定な数値スキームを用いた場合においても信頼できる数値計算が可能となる．これは，多倍長数値計算が計算機による数値計算の可能性を広げることを示すものであり，特に逆問題に現れる非適切問題の数値解析に対して新たな手法となり得ることを示している．

参考文献

(1) H. Fujiwara, Y. Iso, *Some Remarks on the Choice of Regularization Parameters under Multiple-Precision Arithmetic*, Theoretical and Applied Mechanics (submitted).

(2) P. C. Hansen, *Analysis of Discrete Ill-posed Problems by Means of the L-curve*, SIAM REVIEW, **34** (1992) pp.561–580.

(3) K. Hayakawa, *Convergence of Finite Difference Scheme and Analytic Data*, Publ. Res. Inst. Math. Sci., **24** (1988) pp.759–764.

(4) IEEE, *IEEE Standard 754-1985 for Binary Floating-Point Arithmetic*, (Reprinted in SIGPLAN, **22** (1987) pp.9–25).

(5) R. Lattès, J.L. Lions, The Method of Quasi-Reversibility : Application to Partial Differential Equations, American Elsevier (1969).

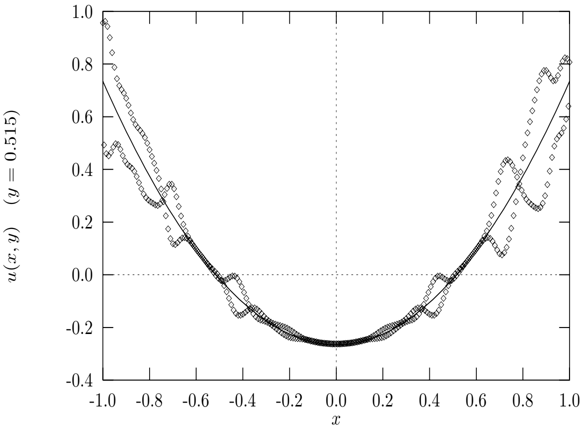

図 5. 100 桁での結果 $(\Delta x = \Delta y = 0.005, y = 0.515)$

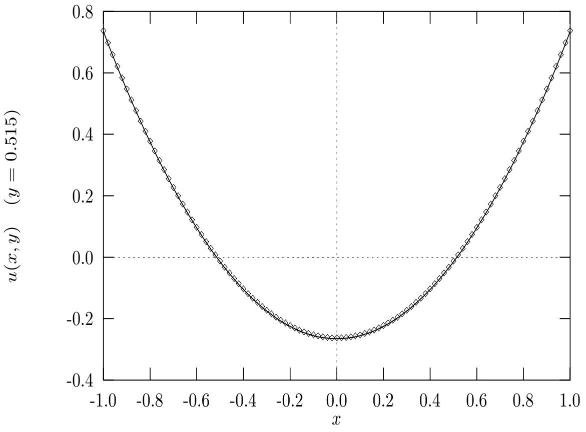

図 6. 120 桁での結果 $(\Delta x = \Delta y = 0.005, y = 0.515)$

(6) 藤原宏志，多倍長計算環境の構築と非適切問題の数値計算，京都大学大学院情報学研究科，修士学位論文 (2000).