

計算機援用によるエノン型方程式の正值対称解の多重性解析

浅井 大晴¹, 田中 一成¹, 大石 進一¹

¹ 早稲田大学

e-mail : captino@fuji.waseda.jp

1 はじめに

本研究では 1 次元エノン型方程式を取り扱う。すなわち 2 点境界値問題：

$$\begin{cases} -u'' = (|x|^l + \lambda)u^p, & x \in (-1, 1), \\ u(-1) = u(1) = 0, \end{cases} \quad (1)$$

を考える。ここで、パラメータ $l \geq 0$ はポテンシャル指数と呼ばれ、パラメータ $p \geq 2$ はポリトロピック指数と呼ばれる。 $\lambda = 0$ の時は、エノン方程式 $-u'' = |x|^l u^p$ と呼ばれている。同方程式の数学的研究が最近 10 年盛んになっており、その解の多重性に関する研究 [1] の中で $\lambda \geq 0$ を付加し作られた方程式が、本エノン型方程式 (1) である。エノン型方程式 (1) は、エノン方程式よりもさらに多くの多重解が存在するとされ、その分岐の条件等が研究されている。近年の理論研究 [2] では、「パラメータ p を固定して問題を考えたときに、パラメータ (l, λ) のごく限られた組み合わせにおいて正值対称解は多重性を持つ。」とされ、その条件等が検討されている。しかしながら、未だ多重解を持つための十分条件しか解明されておらず、厳密な分岐点や分岐点付近の多重解の存在性等、分岐構造については完全には明らかにされていない。

そこで、本研究では分岐構造の解明のため、分岐点付近の正值対称解の存在性検証と分岐図の追跡を精度保証付き数値計算で行うことを試みた。結果として、研究 [2] で予想されていたように S 字のカーブを持つ分岐があることが明らかとなり、また、分岐の消失点も明らかとなった。それらの計算機援用証明した結果を報告する。

2 解曲線の追跡

エノン型方程式 (1) の解の局所一意存在証明には Newton—Kantorovich の定理 [3] をベースとした手法を用いる。パラメータ λ に関する小区間で解の局所一意存在証明を繰り返すことにより、解曲線を連続的に追跡する。すべての数値計算は区間演算などの精度保証付き数値計算技術を用いて行われるため、丸め誤差の影響を考慮した厳密な結果が得られる。図 1 は $p = 5, l = 20$ で固定し、 λ を動かしたときの解曲線である。この時、真の折り返し点は

$$\begin{aligned} \lambda_1 &\in [4.3366, 4.3401] \times 10^{-5}, \\ \lambda_2 &\in [1.0497, 1.0498] \times 10^{-4}, \end{aligned}$$

に存在することが証明できた。

さらに、 $p = 5$ と固定し、 (l, λ) を動かして折り返し点をプロットすると以下の図 2 のようになる。図 2 のグラフの先端部分にあたる折り返し分岐が消失する点は、

$$\begin{aligned} l &\in [10.981, 10.982], \\ \lambda &\in [5.3414, 5.3427] \times 10^{-4}, \end{aligned}$$

に存在することが証明できた。

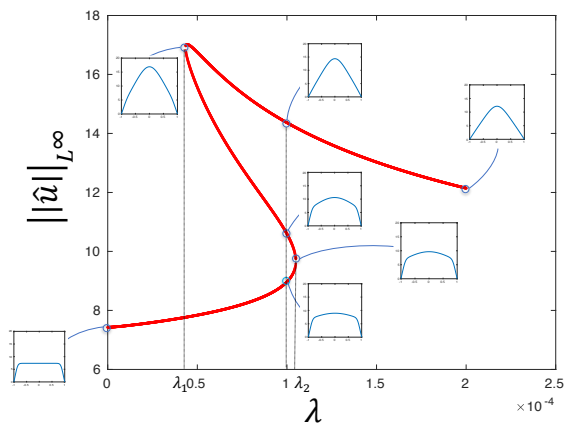


図 1. 解曲線 ($p = 5, l = 20$)

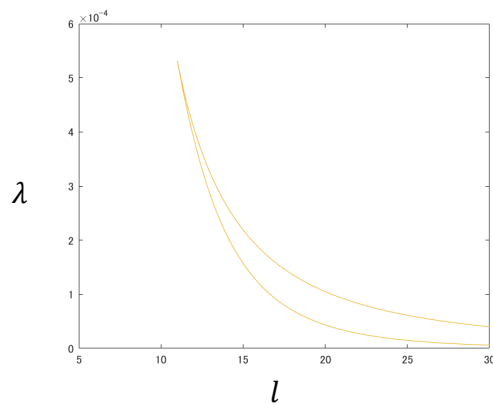


図 2. $p = 5$ の時の折り返し点 (l, λ) の集合

3 全解探索

先行研究 [1, Cor.4.1] より、 u が (1) の正値解であるならば、

$$\|u\|_{L^\infty} \leq 2^{\frac{p}{p-1}} \left[B(l+1, p+2) + \frac{\lambda}{p+2} \right]^{-\frac{1}{p-1}}$$

を満たすこと (ただし $B(x, y)$ はベータ関数) と、kv ライブラリ [4] の「射撃法による境界値問題の精度保証」、「非線形方程式の全解探索」を用いることで、例えば $p = 5, l = 20, \lambda = 2^{-14}$ のパラメータ値の時は以下のような 3 種類の正値対称解だけが存在すること、即ちこれら以外の正値対称解が存在しないことが示された。

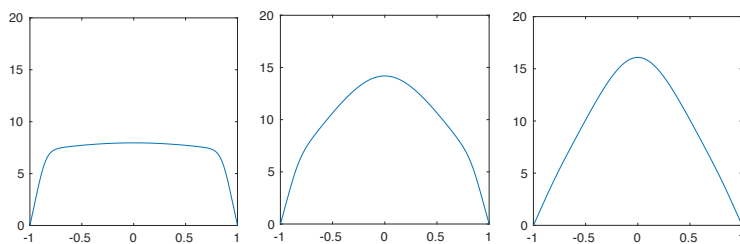


図 3. 3 種類の正値対称解 ($p = 5, l = 20, \lambda = 2^{-14}$)

謝辞 本研究は JSPS 科研費 23K19016 の助成を受けたものである。

参考文献

- [1] S. Tanaka, Morse index and symmetry-breaking for positive solutions of one-dimensional Hénon type equations, *Journal of Differential Equations*, 255:7 (2013), 1709–1733.
- [2] K. Watanabe, S. Tanaka, N. Shioji, Multiple existence of positive even solutions for a two point boundary value problem on some very narrow possible parameter set, *Journal of Mathematical Analysis and Applications* 513.1 (2022): 126182.
- [3] P. Deufhard, G. Heindl, Affine invariant convergence theorems for newton's method and extensions to related methods, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 16:1(1979), 1–10.
- [4] M. Kashiwagi, kv library, (2024). <http://verifiedby.me/kv/>

微分方程式の作用素解析で用いられる行列ノルムの精度保証

寺尾 剛史¹, 尾崎 克久², 渡部 善隆¹

¹ 九州大学, ² 芝浦工業大学

e-mail : terao.takeshi.412@m.kyushu-u.ac.jp

1 概要

本稿では、行列 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ と対称正定値行列 $B_1, B_2 \in \mathbb{R}^{n \times n}$ を考える。 $B_i = R_i^T R_i, i = 1, 2$ とするとき、 $R_1 A^{-1} R_2^T$ の最大特異値 ρ の上限は、偏微分方程式の解に対する計算機援用証明にしばしば要求される [1]。ここで、 A が対称行列かつ $B_1 = B_2 =: B$ のとき、

$$A^2 - \theta B^2 \succ 0 \implies \rho < \sqrt{\theta^{-1}} \quad (1)$$

が成り立つことが知られている [2]。ただし、 $B \succ 0$ は行列 B が正定値であることを意味する。一方で、一般の A に対しては B_i に対する区間 Cholesky 分解が必要であり、計算時間や数値的安定性に課題がある。本稿では、区間 Cholesky 分解を必要としない新しいアルゴリズムを提案する。

2 提案手法

行列 $R_1 A^{-1} R_2^T$ に対する特異値を $\sigma_i, 1 \leq i \leq n$ と表記する。また、拡大行列

$$\bar{A} = \begin{pmatrix} O & A^T \\ A & O \end{pmatrix}, \quad \bar{B} = \begin{pmatrix} B_1 & O \\ O & B_2 \end{pmatrix} \quad (2)$$

に対して、一般化固有値問題 $\bar{A}x = \lambda \bar{B}x$ を考える。このとき、

$$\lambda^{-1} \in \{\pm\sigma_1, \dots, \pm\sigma_n\} \quad (3)$$

が成り立つ。よって、 $\|R_1 A^{-1} R_2^T\|_2 = \max \lambda^{-1}$ が成り立つ。

2.1 手法 1

行列 \bar{A}, \bar{B} に対して、

$$\bar{A}^2 = \begin{pmatrix} A^T A & O \\ O & A A^T \end{pmatrix}, \quad \bar{B}^2 = \begin{pmatrix} B_1^2 & O \\ O & B_2^2 \end{pmatrix} \quad (4)$$

であるから (1) より、 $\theta > 0$ に対して

$$A^T A - \theta B_1^2 \succ 0, \quad A A^T - \theta B_2^2 \succ 0 \implies \rho < \sqrt{\theta^{-1}} \quad (5)$$

が成り立つ。対称行列の正定値性の検証については、Cholesky 分解を用いた高速な手法が提案されている [3]。この手法は、条件数 $\kappa_2(A) = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2$ に対して、 $\kappa_2(A^T A) = \kappa_2(A A^T) = \kappa_2(A)^2$ である。よって、単位相対丸め u に対して $\kappa_2(A) \lesssim \sqrt{u^{-1}}$ を満たす必要がある。

2.2 手法 2

行列 $R_2^{-T}AR_1^{-1}$ の最小特異値の下限を考えると、正定値対称行列 $R_1^{-T}A^TB_2^{-1}AR_1^{-1}$ または $R_2^{-T}AB_1^{-1}A^TR_2^{-1}$ の最小固有値を考えればよい。よって $\theta > 0$ に対して

$$A^TB_2^{-1}A - \theta B_1 \succ 0 \quad \text{または} \quad AB_1^{-1}A^T - \theta B_2 \succ 0 \quad (6)$$

が成り立つとき、 $\rho < \sqrt{\theta^{-1}}$ が成り立つ。この手法は、手法 1 と同様に $\kappa_2(R_2^{-1}A) \lesssim \sqrt{u^{-1}}$ または $\kappa_2(R_1^{-1}A^T) \lesssim \sqrt{u^{-1}}$ である必要がある。また、

2.3 手法 3

式 (3) から

$$G_\theta = \begin{pmatrix} \theta B_1 & A^T \\ A & \theta B_2 \end{pmatrix} \quad (7)$$

に対して、正または負の固有値の数が n 個であるとき、 $\rho \leq \theta^{-1}$ が成り立つ。正と負の固有値の数は、LDL^T 分解と Sylvester の慣性則から厳密に評価が可能である [4, 5]。この方法は、 $\kappa_2(R_1A^{-1}R_2^T) \lesssim u^{-1}$ まで適用が可能であり、手法 1、2 と比較して、より悪条件な問題に対して適用が可能である。

3 まとめ

本稿では、行列 $R_1A^{-1}R_2^T$ の最大特異値の上限の計算法について述べた。これらの手法は、与えられた行列 A, B_1, B_2 によって優れた手法が異なる。与えられた行列が十分に良条件の場合、手法 1 が有用であり、特に B_1 または B_2 が対角行列のように逆行列が容易に計算できる場合には手法 2 が有用である。また、手法 1、2 を用いて精度保証が失敗するような行列に対しては、手法 3 が有効となる。発表では、数値実験による提案手法と従来手法の比較を行い、提案手法の有用性を示す。

参考文献

- [1] 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. サイエンス社, 2011.
- [2] Siegfried M Rump. Verified bounds for singular values, in particular for the spectral norm of a matrix and its inverse. *BIT Numerical Mathematics*, Vol. 51, pp. 367–384, 2011.
- [3] Siegfried M Rump. Verification of positive definiteness. *BIT Numerical Mathematics*, Vol. 46, pp. 433–452, 2006.
- [4] Siegfried M. Rump. *Validated solution of large linear systems*. Springer, 1993.
- [5] Nobito Yamamoto. A simple method for error bounds of eigenvalues of symmetric matrices. *Linear Algebra and its Applications*, Vol. 324, No. 1-3, pp. 227–234, 2001.

数値線形代数に対する再現性のある試行型テスト行列生成法

内野 佑基¹, 尾崎 克久²

¹ 理化学研究所 計算科学研究センター, ² 芝浦工業大学 システム理工学部 数理科学科
e-mail : yuki.uchino.fe@riken.jp

1 概要

数値線形代数の諸問題に対するテスト行列生成法を紹介する。本手法により生成される問題は真の解が既知であり、近似解の誤差の検証に有用となる。先行研究では、無誤差変換を応用した生成法が提案されている。この手法は生成される行列の条件数に制約を伴うが、再現性をもつ。近年、条件数の制約を試行的に緩和する手法が提案されたが、再現性が損なわれる問題がある。本講演では、再現性を損なわない手法を提案する。

2 先行研究の紹介

数値線形代数の諸問題に対する真の解がわかるテスト問題生成法を紹介する。本研究では、オーバーフロー・アンダーフローは発生しないものとする。これまでに表 1 に挙げる手法が提案されている。本研究では [2, 4, 5, 6] の手法に着目する。

表 1. 先行研究

Authors	Year	Linear systems	Least squares	Sylvester equation	SEVD	GEVD	SVD
Miyajima et al. [1]	2005	✓					
Ozaki and Ogita [2]	2017	✓					
Ozaki [3]	2019				✓		✓
Ozaki and Ogita [4]	2022				✓		✓
Ozaki et al. [5]	2022	✓	✓		✓		✓
Ozaki et al. [6]	2023	✓	✓	✓	✓	✓	✓

ある精度の 2 進浮動小数点数の集合を \mathbb{F} , 数値計算結果を $\text{fl}(\cdot)$ と表記する。文献 [2] では、ユーザが与えた $A \in \mathbb{F}^{n \times n}$, $x \in \mathbb{F}^n$ に対して

$$\hat{A}x = \text{fl}(\hat{A}x) =: b, \quad \hat{A} + \Delta A := A, \quad |\hat{a}_{ij}| > |\Delta a_{ij}| \text{ (if } \hat{a}_{ij} \neq 0) \quad (1)$$

を満たす行列 $\hat{A} \in \mathbb{F}^{n \times n}$ を生成する手法が提案された。テスト行列 \hat{A} は浮動小数点数で厳密に表現可能である。この生成法では、任意の順序で計算される $\text{fl}(\hat{A}x)$ に対する確定的誤差解析に基づいて \hat{A} を抽出する。したがって、生成可能な問題の条件数には問題サイズに大きく依存した制約が付される。文献 [4, 5] ではこの手法を固有値問題、特異値分解、最小二乗問題等の様々な問題に拡張した。

文献 [6] では $|\Delta a_{ij}|$ を強制的に縮小することで制約を緩和する手法が提案された。この手法では、上向き丸め・下向き丸めモードでそれぞれ $b := \text{fl}(\hat{A}x)$ を生成し、それらの一致により無誤差を判定する。無誤差ではない場合には $|\Delta a_{ij}|$ を拡大し、無誤差の判定を再度行う。以上の反復により、生成される行列に対する制約を緩和できる。計算結果から無誤差を判定するため、最終的な $|\Delta a_{ij}|$ 及び \hat{A} は計算順序に依存する。本試行型アプローチについても固有値問題、特異値分解、最小二乗問

題等に対する拡張が提案されている.

3 提案手法

本研究では再現性のある試行型アプローチを提案する. まず, $A \in \mathbb{F}^{n \times n}$ に対して文献 [2] の方法 (式 (1)) と同様に

$$\hat{A}^{(1)}x = \text{fl}(\hat{A}^{(1)}x) =: b^{(1)}, \quad \hat{A}^{(1)} + \Delta A^{(1)} := A, \quad |\hat{a}_{ij}^{(1)}| > |\Delta a_{ij}^{(1)}| \text{ (if } \hat{a}_{ij}^{(1)} \neq 0)$$

を満たす $\hat{A}^{(1)}, b^{(1)}$ を決定する. これらは任意の計算順序に対する確定的誤差解析により決定されるため, 再現性がある. 次に, $\Delta A^{(1)}$ から

$$\hat{A}^{(2)}x = \text{fl}(\hat{A}^{(2)}x) =: b^{(2)}, \quad \hat{A}^{(2)} + \Delta A^{(2)} := \Delta A^{(1)}, \quad |\hat{a}_{ij}^{(2)}| > |\Delta a_{ij}^{(2)}| \text{ (if } \hat{a}_{ij}^{(2)} \neq 0) \quad (2)$$

を満たす $\hat{A}^{(2)}, b^{(2)}$ を再現性があるように決定する. これらは $\hat{A}^{(1)} + \hat{A}^{(2)}$ が文献 [6] の方法の \hat{A} の初期値と同程度になるように決定するか, 文献 [2] の方法で決定する. ここで,

$$(\hat{A}^{(1)} + \hat{A}^{(2)})x = \text{fl}(\hat{A}^{(1)} + \hat{A}^{(2)})x = b^{(1)} + b^{(2)}$$

が成立する. よって,

$$\text{fl}(b^{(1)} + b^{(2)}) = b^{(1)} + b^{(2)} \quad (3)$$

を満たせば厳密に浮動小数点数で表現可能な問題が生成される. 式 (3) を満たさない場合には式 (2) の $\Delta a_{ij}^{(2)}$ を縮小して再度実行する. 以上の反復により, 生成される行列に対する制約を緩和できる. 式 (3) における無誤差の判定には Dekker による和のエラーフリー変換 [7] を使用する. したがって無誤差の判定の計算順序は固定されるため, 再現性がある.

謝辞 本研究は特別研究員奨励費 (22KJ2741) 及び科研費 (23K28100) の助成を受けた.

参考文献

- [1] S. Miyajima, T. Ogita, and S. Oishi, A Method of Generating Linear Systems with an Arbitrarily Ill-Conditioned Matrix and an Arbitrary Solution, in: Proc. of NOLTA 2005, pp. 741–744, 2005.
- [2] K. Ozaki and T. Ogita, Generation of Linear Systems with Specified Solutions for Numerical Experiments, Reliable Computing, 25 (2017), 148–167.
- [3] K. Ozaki, Generation of Floating-point Ill-conditioned Matrices, in: Proc. of JSST 2019, pp. 8–9, 2019.
- [4] K. Ozaki and T. Ogita, Generation of Test Matrices with Specified Eigenvalues using Floating-point Arithmetic, Numer. Algorithms, 90:1 (2022), 241–262.
- [5] 尾崎 克久, 寺尾 剛史, 内野 佑基, 数値線形代数の諸問題に対する真の解がわかるテスト行列の生成法, 日本応用数理学会 2022 年度年会, 北海道大学, 2022.
- [6] 尾崎 克久, 内野 佑基, 寺尾 剛史, 数値線形代数の諸問題に対するテスト行列の生成法の改良, 日本応用数理学会 第 19 回研究部会連合発表会, 岡山理科大学, 2023.
- [7] T.J. Dekker, A floating-point technique for extending the available precision, Numer. Math., 18:3 (1971), 224–242.

疑似的な高精度演算のブロックコレスキー分解への適用

矢崎 雪莉¹, 尾崎 克久²

¹ 芝浦工業大学大学院, ² 芝浦工業大学

e-mail : bv20002@shibaura-it.ac.jp

1 概要

IEEE 754 が定める 2 進浮動小数点数とその演算は数値計算ではよく用いられる。通常の浮動小数点数を用いて計算した結果の精度に満足できない場合、より高精度な演算を用いることが考えられる。特に、仮数部の長さのみが精度の問題で、指数部を拡張しなくて良い場合、Double-word (DW) 演算 [1], Triple-word (TW) 演算 [2], Quad-word (QW) 演算 [1] を使用するという方法が知られている。DW 演算を簡素化した Pair Arithmetic (PA) [3] を Lange と Rump が提案し、TW 演算、QW 演算を簡素化した疑似 Triple-word (QTW) 演算、疑似 Quad-word (QQW) 演算 [4] を尾崎・今村が提案した。本発表では、PA, QTW 演算、QQW 演算をブロックコレスキー分解に適用した結果を紹介する。また、疑似正規化を演算回数の少ない部分に適用した結果と、OpenMP [5] を使用して並列化も行った。

2 提案手法の概要

2.1 ブロックコレスキー分解

コレスキー分解とは、対称正定値行列 A に対して $A = R^T R$ を満たすような上三角行列 R を求める行列分解である。行列をブロック化してコレスキー分解を行うものをブロックコレスキー分解という。以下に、ブロックコレスキー分解の手順を示す。

STEP 1 ブロック化する必要があれば、行列 A を 4 つにブロック化して A_{11} に対してコレスキー分解を行い、 R_{11} を得る。必要なければ、そのままコレスキー分解を行って終了する

STEP 2 $A_{12} = R_{11}^T R_{12}$ を解いて、 R_{12} を求める

STEP 3 $A_{22} - R_{12}^T R_{12}$ で得られた行列を新たな A とする

2.2 疑似正規化

精度の劣化を防ぐために、演算の適切な部分に疑似正規化を適用する。疑似正規化とは、2 つの浮動小数点数 a, b がある場合、

$$\text{f1}(a + b) = a, \quad u|a| \geq |b| \quad (u : \text{単位相対丸め}) \quad (1)$$

の構造を持たせることである。ここで、 $\text{f1}(\cdot)$ は浮動小数点演算の結果を意味する表記とする。元の浮動小数点数 a, b がこの構造を持っていなくても、[6] による TwoSum と呼ばれるアルゴリズムを使用することで、この構造を満たすことが可能である。ここで、QTW 演算、QQW 演算では TwoSum では、構成する 2 数が、必ずしも式 (1) を満たしているとは限らない。今回の実験では、STEP 1 の除算と平方根の計算の前後、STEP 2 の除算の前後に疑似正規化を行う。STEP 3 では、すべての処理が終わった後に疑似正規化を行うが、これを行わない場合でも十分な精度で上三角行列 R を求め

ることができる。STEP 1, STEP 2 はブロックコレスキー分解の演算全体に対して演算回数が少ない部分であるため、演算時間への影響が小さい。PA や QTW 演算, QQW 演算について疑似正規化を行うことで、結果の精度が向上することが期待できる。

また、STEP 3 に OpenMP を使用して並列化を行うことで、演算時間が短縮されることが期待できる。

3 数値実験結果

計算結果の精度は、相対残差 $\|A - R^T R\|_\infty / \|A\|_\infty$ を用いて検証する。図 1 は、ブロックコレスキー分解に単純な PA, QTW 演算, QQW 演算を適用したものと、疑似正規化を行ったもの、DW 演算, TW 演算, QW 演算を適用したものの相対残差 (relative residual norm) を条件数 (cnd) を増やしながら示したものである。行列サイズは 1000×1000 、疑似正規化には TwoSum を使用した。

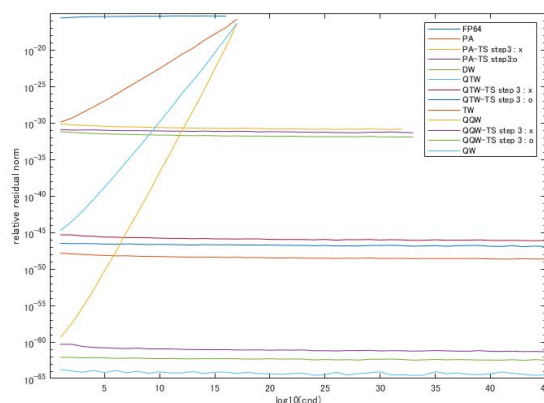


図 1. 計算結果の精度

図 1 より、疑似正規化を行うことで高精度に演算できていることが分かる。さらに STEP 3 の部分で疑似正規化を行う場合、行わない場合と比較して高精度に演算できていることがわかる。また、単純な PA, QTW 演算, QQW 演算を適用したものは途中で計算できなくなっている。発表では、OpenMP を使用した演算時間について示す。

参考文献

- [1] Y. Hida, X.S. Li and D.H. Bailey: Library for double-double and quad-double arithmetic, *NERSC Division, Lawrence Berkeley National Laboratory* (2007).
- [2] N. Fabiano, J.M. Muller and J. Picot: Algorithms for Triple-Word Arithmetic, *IEEE Transactions on Computers*, **68**:11 (2019), 1573 – 1583.
- [3] M. Lange and S.M. Rump: Faithfully rounded floating-point computations, *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, **46**:3 (2020), 1 – 20.
- [4] 尾崎 克久, 今村 俊幸: Pair Arithmetic の拡張とその使い方について, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), 2023-HPC-192, 19 (2023), 1 – 8.
- [5] OpenMP Web Page, <https://www.openmp.org/>.
- [6] D.E. Knuth: The Art of Computer Programming, Volume 2: Seminumerical Algorithms (3rd ed.). Addison-Wesley, 1997.