非線形問題に対する精度保証法の確立

研究代表者 大石 進一
(基幹理工学部 応用数理学科 教授)

1. 非線形問題に対する精度保証法の確立

本プロジェクトは非線形問題に対する精度保証付き数値計算理論を発展させ、モデリングの信頼性や現象との整合性を数値的に検証できるようにする精度保証理論を用いた方法論を確立する。具体的には次の目標を達成する。

- ・並列計算法の高速性を保持した1億次元程度の大規模スパース系の高効率な精度保証付き数値計算法を開発

- ・モデル方程式の信頼性を検討するための精度保証理論の発展

数値計算に生じるすべての誤差を考慮し、数学的に正しい結果を数値計算によって導く計算法を「精度保証付き数値計算」と呼ぶ。本研究計画者はモデリングの信頼性を与えるための基礎となる精度保証付き数値計算理論および高精度計算アルゴリズムの開発を行ってきた。本プロジェクトではこれを発展させ、現代のシミュレーションの最前線で計算されているような1億次元程度の連立方程式の解を求めるような大規模の問題を扱う。この規模になると良条件問題でも計算誤差が累積して、解の精度が一桁も正しくない現象が多々生じてくる。そこで誤差の蓄積に対して本研究計画者らの高精度計算法を導入し、高速・高効率な精度保証付き数値計算法を開発する。

さらに精度保証付き数値計算理論の基盤を応用することにより、現代のモデル方程式の信頼性を検討する。そして実問題を扱う中で精度保証理論をも開拓していく。例えば、物質の反応・拡散を記述する反応拡散方程式の一つであるFitzHugh-Nagumo方程式に対して、近似解の近傍での解の存在検証を精度保証付き数値計算によって実現する。本研究では各種の数値モデルに対する計算機援用解析理論を構築し、モデル方程式の信頼性を検討するための精度保証理論を発展させる。

2. 主な研究成果

2.1 半群理論を用いた半線形熱方程式の解の精度保証付き数値計算法の確立

本研究では、半群理論を用いた半線形熱方程式の解の精度保証付き数値計算法を提案する。半群を用いた半線形熱方程式の解の不動点形式を導入し、近似解の近傍に解が存在するための十分条件を与える。その条件が成立するかどうかを計算機によって確かめることができる。

2.2 Sobolev の埋め込み定数のシャープな評価

偏微分方程式の解の精度保証付き数値計算法において、ソボレフの埋め込み定数の定量的かつシャープな評価が必要とされる。今まで精度保証付き数値計算法への応用を目的とした数々の埋め込み定数の定量的な評価が提案されてきた。そこで、凸領域上のDirichlet境界条件下におけるソボレフの埋め込み定数のシャープな評価を考える。まず、ある楕円型方程式の近似解とラプラス作用素の最小固有値の評価を技巧的に用いて、その方程式の厳密解の存在とその正值性を検証した。次にその検証結果を使ってソボレフの埋め込み定数の最良値をシャープに評価する方法を導いた。そして、ソボレフの埋め込み定数の最良定数に近い値を算出することができた。

2.3 常微分方程式の解の爆発時刻の解明

微分方程式の解の挙動のなかには爆発するものが存在する。既存の解析的な結果では、その存在や爆発レートなどが研究されているが、爆発する具体的な時刻はわかっていない。本研究において、常微分方程式の解の爆発時刻を考える。コンパクト化と時間のスケール変換により常微分方程式をある同値な式に変換した後に、リヤプノフ関数の性質を使い、爆発時刻を割り出す公式を編み出した。さらに柏木雅英教授(早稲田大学)の kv ライブラリーを用いて爆発するギリギリの時刻まで解の存在を検証し、上記の公式を使って爆発時刻を得た。

2.4 線形問題の鞍点に対する高速な数値的検証法

数値計画法においてその問題の最適値を求めるために必要な鞍点の解析が進んでいる。本研究では、係数行列の対角ブロックが半正定値である行列によって表現される線形問題の鞍点を高速にかつ、精度保証付きで計算する方法を提案した。さらにその方法は離散化した偏微分方程式に対して、効果的に応用された。

3. 共同研究者

関根晃太(早稲田大学 助教), 森倉悠介(早稲田大学 助教),
南畑淳史(早稲田大学 助手), 柳澤優香(早稲田大学 次席研究員).

4. 研究業績

4.1 学術論文

- [1] Makoto Mizuguchi, Akitoshi Takayasu, Takayuki Kubo, and Shin'ichi Oishi, "On the embedding constant of the Sobolev type inequality for fractional derivatives", *Nonlinear Theory and Its Applications*, IEICE, Vol. 7, No. 3, pp. 386-394, 2017.
- [2] Akitoshi Takayasu, Kaname Matsue, Takiko Sasaki, Kazuaki Tanaka, Makoto Mizuguchi, and Shin'ichi Oishi, "Numerical validation of blow-up solutions of ordinary differential equations", *J. Comput. Appl. Math.*, Vol. 314, pp.10-29, 2017.
- [3] Makoto Mizuguchi, Akitoshi Takayasu, Takayuki Kubo, and Shinichi Oishi, "Numerical verification for existence of a global-in-time solution to semilinear parabolic equations", *J. Comput. Appl. Math.*, Vol. 315, pp. 1-16, 2017.
- [4] Makoto Mizuguchi, Akitoshi Takayasu, Takayuki Kubo and Shin'ichi Oishi, "A method of verified computations for solutions to semilinear parabolic equations using semigroup theory", *SIAM J. Numer. Anal.* (In Press)
- [5] Ryo Kobayashi, Takuma Kimura, and Shin'ichi Oishi, "A method for verifying the accuracy of numerical solutions of symmetric saddle point linear systems", *Numerical algorithms*. (In Press)
- [6] Yuka Yanagisawa, Takeshi Ogita, and Shin'ichi Oishi, "A modified algorithm for accurate inverse Cholesky factorization", *数理解析研究所講究録*, No.2005, pp. 44-56, 2016.
- [7] Siegfried. M. Rump, Takeshi Ogita, Yusuke Morikura and Shin'ichi Oishi, "Interval arithmetic with fixed rounding mode", *Nonlinear Theory and Its Applications*, IEICE, vol. 7, No. 3, pp.362-373, 2016.
- [8] Kazuaki Tanaka, Kouta Sekine, Makoto Mizuguchi, and Shin'ichi Oishi, "Sharp numerical inclusion of the best constant for embedding $H^1_0(\Omega) \hookrightarrow L^p(\Omega)$ on bounded convex domain", *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 311, pp. 306-313, 2017.

- [9] Akitoshi Takayasu, Makoto Mizuguchi, Takayuki Kubo, and Shin'ichi Oishi, "Verified Computations for Solutions to Semilinear Parabolic Equations Using the Evolution Operator", in Mathematical Aspects of Computer and Information Sciences, the series Lecture Notes in Computer Science, Vol. 9582, pp. 218-223, 2016

4.2 総説・著書 特になし

4.3 招待講演

- [1] 大石進一, 精度保証付き数値計算の基礎について, 第25回現象数理コロキウム, 明治大学, 2017/2/21

- [2] 関根晃太, 田中一成, 大石進一, ある無限次元固有値を用いた楕円型偏微分方程式の解の存在性に対する計算機援用証明法, RIMS 研究集会 現象解明に向けた数値解析学の新展開 II, 京都大学, 2016/10/21.

- [3] 関根晃太, 田中一成, 大石進一, 有界な凸領域における連立楕円型偏微分方程式の解の計算機援用存在証明法, Proceedings of the Twenty-Eighth RAMP Stmposium, Nigata University, 2016/10/13.

- [4] 田中一成, 関根晃太, 大石進一, 楕円型微分方程式の正值解に対する精度保証付き数値計算法(Verified numerical computation method for positive solutions to elliptic differential equations), RIMS 研究集会 「現象解明に向けた数値解析学の新展開 II」, 京都大学, 2016/10/21

- [5] Shin'ichi Oishi and Kazuaki Tanaka, Rigorous numerical inclusions of positive solutions to elliptic problems, International Workshop on Enclosure Methods, Freudenstadt, Germany, 2016/9/23.

4.4 受賞・表彰

- [1] 若山馨太, 田中一成, 関根晃太, 尾崎克久, 大石進一, 日本応用数理学会 2016 年度 年会 優秀ポスター賞, 日本応用数理学会 2016 年度 年会, 北九州国際会議場, 2016/9/13

- [2] 木村翔矢, 関根晃太, 大石進一, 日本応用数理学会 2016 年度 年会 優秀ポスター賞, 日本応用数理学会 2016 年度 年会, 北九州国際会議場, 2016/9/13

- [3] Akitoshi Takayasu, Makoto Mizuguchi, Takayuki Kubo and Shin'ichi Oishi, JSST 2016 Outstanding Presentation Award, JAPAN SOCIETY FOR SMILATION TECHNOLOGY, Kyoto University, 2016/10/1

- [4] 高安亮紀, 松江要, 佐々木多希子, 田中一成, 水口信, 大石進一, 日本応用数理学会 2015 年度若手優秀講演賞, 日本応用数理学会, 金沢大学, 2016/6/24

4.5 学会および社会的活動

- [1] 2016 年日本応用数理学会年会 実行委員

- [2] INVA2017(The International Workshop on Numerical Verification and its Applications) 実行委員

5. 研究活動の課題と展望

本研究は 2016 年 4 月に発足したプロジェクト研究であり, この 1 年の間に様々な成果をあげた。特に本年度は, 放物型方程式の解の精度保証付き数値計算法の提案, Dirichlet 境界上のソボレフの埋め込み定数のシャープな評価, 常微分方程式の解の爆発時刻の解明など微分方程式の分野における研究成果が多くみられる。今後は本研究成果を応用して, より難解な数理モデル方程式の解の存在を検証していく。当面の目標は, ノイマン条件下における楕円型方程式や連立型の放物型方程式の解の存在検証ができるような手法を確立することである。