

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理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 発展作用素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

昨年時の成果で構築した半群理論による半線形熱方程式の解の精度保証付き数値計算法を改良する。ラプラシアンに摂動を加えた微分作用素に対して、半群理論の応用である「発展作用素」を用いて精度保証法の定式化を行った。その結果、以前の手法と比較して3倍ほど解の検証手法の精度を上げることができた。

2.2 Sobolev の埋め込み定数の定量的な評価法の提案

ソボレフの埋め込み定数の定量的な評価を考える。今年度は昨年度に比べて適応できる領域の範囲を広げて境界に条件を加えないソボレフの埋め込み定数の評価法を提案した。そして以前に我々が提案した一般のソボレフの埋め込み定数の評価法に比べて、断然シャープな結果が得られた。

2.3 線形問題の鞍点に対する高速な数値的検証法の確立

数理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、対称な鞍点行列を係数に持つ連立一次方程式の解を高速にかつ、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．

2.4 疎行列の固有値問題に対するロバストな精度保証法の確立

本研究の目的は，次の行列の一般化固有値問題

$$Ax = \lambda Bx \quad (A: n \times n \text{ の実対称行列}, B: n \times n \text{ の実対称正定値行列})$$

のある特定の固有値 λ とその大きさの順位まで求めて，厳密に評価する方法の構築である．申請者は，Lehman-Goerisch の方法とブロック修正コレスキー分解の事前誤差評価に基づき，従来法の欠点である数値安定性が確保されていない，計算コストが大きいなどを克服することで，大規模な疎行列に適用する高速かつ高精度な新しい解法を構築した．

3. 共同研究者

南畑 淳史(早稲田大学 次席研究員)， 柳澤 優香(早稲田大学 次席研究員)，
田中 一成(早稲田大学 助教)，水口 信(早稲田大学 次席研究員)，
内海 晋弥(早稲田大学 助手)

4. 研究業績

4.1 学術論文

- [1] 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., Vol. 55, No.2, pp. 980-1001, 2017
- [2] Akitoshi Takayasu, Makoto Mizuguchi, Takayuki Kubo, and Shin'ichi Oishi, "Accurate method of verified computing for solutions of semilinear heat equations", Reliable computing, Vol.25, pp. 74-99, 2017
- [3] 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, Volume.76, Issue.1, pp.33--51, September 2017
- [4] Makoto Mizuguchi, Kazuaki Tanaka, Kouta Sekine, and Shin'ichi Oishi: Estimation of Sobolev embedding constant on a domain dividable into bounded convex domains, Journal of Inequalities and Applications, 299 (2017).
- [5] Makoto. Mizuguchi, Akitoshi. Takayasu, Takayuki. Kubo, and Shin'ichi Oishi: "Numerical verification for existence of a global-in-time solution to semilinear parabolic equations", J. Comput. Appl. Math., Vol. 315, pp. 1-16, May 2017
- [6] Akitoshi. Takayasu, Kanae. Matsue, Takiko. Sasaki, Kazunari. 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, Apr. 2017.

4.2 総説・著書

- [1]大石 進一 編，精度保証付き数値計算の基礎，コロナ社，2018 年 6 月発行予定．

4.3 招待講演

- [1] 内海 晋弥，Lagrange-Galerkin 法における諸問題とその解決策：計算可能性・粘性係数依存性・流入境界条件，数値解析セミナー（UTNAS），東京大学大学院数理科学研究科，2017/4/11.
- [2]内海 晋弥，高次要素を用いる圧力安定化 Lagrange-Galerkin スキームによる流れ問題の有限要素計算，第 6 回岐阜数理科学研究会，岐阜大学サテライトキャンパス，2017/6/21.
- [3]柳澤 優香，劉 雪峰，大石 進一，スパース行列に対する固有値の厳密計算手法の開発，京都大学

数理解析研究所・RIMS 共同研究（公開型）数値解析学の最前線 ---理論・方法・応用---,京都大学数理解析研究所,2017/11/9.

[4]S. Oishi, Verified Numerical Computation and Large Scale Computing,SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, Nishi Waseda Campus, Waseda University, Japan, 2018/3/7.

[5]大石進一, 精度保証付き数値計算の理論の進展と応用,CREST・さがけ数学関連領域合同シンポジウム「数学パワーが世界を変える2018」, アキバホール, 2018/1/21.

[6]内海 晋弥, 高次要素を用いる圧力安定化有限要素法の解析と高レイノルズ数流れ問題への応用, RIMS 共同研究(公開型) 数値解析学の最前線 ー理論・方法・応用ー, 京都大学,2017/11/9.

[7]内海 晋弥, 圧力安定化有限要素法による流体問題の数値計算と誤差解析, 数理人セミナー, 早稲田大学,2017/12/8.

[8]S. Uchiumi, A pressure-stabilized finite element method with higher-order elements
The 15th Japanese-German International Workshop on Mathematical Fluid Dynamics,Waseda University, 2018/1/10.

[9]S. Uchiumi, A pressure-stabilized FEM using higher-order elements with application to some channel flows, Numerical Analysis: Applications to Biomedical Problems and Foundations

The University of Tokyo, 2018/2/21.

[10]Y. Yanagisawa, L. Xuefeng, S. Oishi, Robust guaranteed eigenvalue evaluation method, Dagstuhl seminar 17481, Germany, 2017/12/1.

[11]A. Minamihata, T.Ogita and S. Oishi, A note on error bounds for large linear systems, Dagstuhl Seminar 17481, Germany, 2017/12/1.

4.4 受賞・表彰

特になし

4.5 学会および社会的活動

[1] SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP18)実行委員

[2] The International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM)2023 年大会を早稲田大学に招致成功（日本初）.

[3] 東京都立戸塚高等学校で開催された The 4th Symposium for Women Researchers(2017/11/5)に参加し, ポスター発表を行った. 「コンピューターが計算間違い!? 信頼できる数値計算とは」

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 2 年の間に様々な成果をあげた. 来年度は, 主に以下の 2 点について研究を進める予定である.

1) 現在, 精度保証付き数値計算が「不可能」とされている, 縮退した固有値（代数的重複度と幾何的重複度が異なる場合）を持つ固有値問題の精度保証法を研究している. 数値計算だけでなく, 純粋数学を専門とする有識者を集め, 解決へのアプローチを模索している.

2) 偏微分方程式の解に対する精度保証付き数値計算法は格段に進歩しており, 放物型方程式の解の検証までできるようになってきた. しかし長い時間が経過したときの解を検証しようとするとき厳密解と近似解との誤差が大きくなりすぎてしまう. そのため長時間における解の検証ができなくなる欠点を抱えている. その欠点を取り除く手法を模索中である.