

# 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. 研究課題

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。

- 並列計算法の高速度性を保持した 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 Null 空間を用いた $2 \times 2$ Block 行列を係数に持つ連立一次方程式の解の精度保証付き数値計算法の確立

$2 \times 2$  Block 行列を係数に持つ連立一次方程式は、制約付き最適化問題の KKT 条件や偏微分方程式の弱形式を離散化した際に現れ、行列サイズが大きくなるため高速化を必要とする。(1, 1)対角 Block 行列が半正定値である場合、既存の方法では Augment Lagrangian 法を用いて正則化するが、

これにより計算時間が遅くなる。本研究では、Null 空間法を用いて正則化する処理を省き高速化された精度保証付き数値計算法を開発した。

## 2.2 偏微分方程式の正值解に対する精度保証付き数値計算

以下の反応拡散モデルの正值解に対する精度保証付き数値計算を行った。

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, x) = \Delta u(t, x) + f(x, u(t, x)), \quad t \in (0, \infty), \quad x \in \Omega \quad (1)$$

特に(1)の定常解を対象とし、その正值解を数学的に厳密な意味で数値的に包含する手法を開発した。即ち、真の解 $u$ が数値的に求めた近似解 $\hat{u}$ の付近に存在することを具体的な誤差上限 $r$ と共に保証し、更に $u$ の正值性をも数学的に厳密な意味で保証できる手法を開発した。

## 2.3 Lipschitz 定数の評価法

偏微分方程式の解の精度保証付き数値計算をするためには、Lipschitz 定数の値を計算する必要がある。その定数は領域の境界条件や形状によってはその定数の値を評価することが難しい。今年度は有界な凸領域上における Lipschitz 定数を算出する評価法を提案した。さらにその評価法を応用することで様々な境界条件や形状の領域に対する Lipschitz 定数も計算可能となった。

## 3. 共同研究者

田中 一成(早稲田大学 理工学術院総合研究所 数理科学研究所 研究院講師)

柳澤 優香(早稲田大学 理工学術院総合研究所 数理科学研究所 研究院講師)

小林 頌(早稲田大学 基幹理工学部 応用数理学科 講師(任期付き))

水口 信(早稲田大学 基幹理工学部 応用数理学科 講師(任期付き))

## 4. 研究業績

### 4.1 学術論文

[1]酒井将大, 田中一成, 大石進一:半線形楕円型境界値問題の精度保証付き数値計算結果の改善, 日本応用数学会論文誌, 24 巻, 1 号, 17-45, (2019).

[2] Yuta Matsushima, Kazuaki Tanaka, and Shin'ichi Oishi: Numerical verification method for positive solutions of Allen-Cahn equation using sub- and super-solution method, book of abstracts scan 2018, pp.134, 2018 (査読付き proceeding)

[3] Atsushi Minamihata, Takeshi Ogita, Siegfried M. Rump, and Shin'ichi Oishi: Two verification methods for linear systems using H-matrix, book of abstracts scan 2018, pp.146-147, 2018 (査読付き proceeding)

[4] Ryo Kobayashi, Atsushi Minamihata, and Shin'ichi Oishi: Verification method for solution of symmetric saddle point linear system with null space method, book of abstracts scan 2018, pp.150-151, 2018 (査読付き proceeding)

[5] Makoto Mizuguchi, Kazuaki Tanaka, Kouta Sekine, and Shin'ichi Oishi: "Estimation of Sobolev embedding constant on a bounded convex domain", book of abstracts scan 2018, pp.164-165, 2018 (査読付き proceeding)

[6] Xuefeng LIU, Mitsuhiro NAKAO, and Shin'ichi Oishi: Approach to the Stationary Solution

Verification for the Navier-Stokes Equation in 3D Domain, book of abstracts scan 2018, pp.168-169, 2018 (査読付き proceeding)

[7] Naoya Yamanaka, Tomoaki Okayama, and Shin'ichi Oishi: Verified algorithm for the sine integral, book of abstracts scan 2018, pp.170-171, 2018 (査読付き proceeding)

#### 4.2 総説・著書

精度保証付き数値計算の基礎、コロナ出版社 2018年7月出版

#### 4.3 招待講演

[1] Yuka Yanagisawa and Sin'ichi.Oishi, "Robust guaranteed eigenvalue evaluation method, " ICIAM18 Board Meeting & Workshop, Drexel University, Philadelphia, USA, (2018/5/11)

[2] 水口信, 関根 晃太, 中尾充宏, 大石進一 "半線形熱方程式の解の精度保証付き数値計算法について", 第 2 回 精度保証付き数値計算の実問題への応用研究集会, 広島インテリジェントホテル スタジアム前 (本館), (2018/12/1)

#### 4.4 受賞・表彰

日本シミュレーション学会フェロー (大石)

電子情報通信学会功績賞 (大石)

#### 4.5 学会および社会的活動

[1] 2018 Workshop on Recent Results of Mathematical Science and Computer Assisted Proofs., Kanazawa Institute of Technology (2018/5/19)

[2] The 18th International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic, and Verified Numerical Computations(SCAN 2018) Scientific, The International Conference Center at Waseda University (Waseda Campus), Tokyo, Japan.(2018/9/10-15)

[3] 2018 Workshop on Recent views of Nonlinear Analysis, The Toba Chamber of Commerce and Industry(2018/12/8-12/10)

### 5. 研究活動の課題と展望

本プロジェクトは2016年4月に発足し、今年度3月31日に終わりを迎えた。今まで本プロジェクトを支えてくださった関係者の皆様に深く御礼を申し上げますとともに、来年度のプロジェクト発足時から行う予定である研究の展望を以下に記す。

1)  $2 \times 2$  Block 行列を係数に持つ連立一次方程式の解の精度保証付き数値計算法の開発において Null 空間法を用いる場合、誤差の小さい高精度な Null 空間の基底を計算する必要がある。Fundamental basis と呼ばれる Null 空間の基底を用いた高精度な精度保証付き数値計算法を開発する。

2) 時間発展偏微分方程式の解の精度保証付き数値計算法の欠点である「長い時間の解の検証による誤差の過大評価」を克服する術を模索する。今はその下準備として放物型方程式の厳密な評価法を構築している段階であるが、既存の精度保証法を駆使してその解決策を提示したい。