様　式　C－19、F－19－1、Z－19　(共通)

科研費 KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

令和　元 年　 6 月 17 日現在

機関番号：32689

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2017～2018

課題番号：17H07188

研究課題名（和文）反応拡散モデルを記述する偏微分方程式の正値解に対する精度保証付き数値計算法

研究課題名（英文）Verified numerical computation for solutions to partial differential equations describing reaction diffusion models

研究代表者

田中　一成（TANAKA, Kazuaki）

早稲田大学・理工学術院・次席研究員（研究院講師）

研究者番号：00801226

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　1,900,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では以下の反応拡散モデル
$\partial u/\partial t(t,x) = \triangle u(t,x)+f(x,u(t,x)),\ t\in(0,\infty),\ x\in\Omega$ (1)
に対する精度保証付き数値計算法を開発した。特に(1)の定常問題を対象とし、その正値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。本研究で得られた手法は(1)の真の解が数値的に求めた近似解の付近に存在することを具体的な誤差上限と共に保証し、更にその真の解の正値性をも数学的に厳密な意味で保証している。

研究成果の学術的意義や社会的意義
精度保証付き数値計算は全ての誤差を考慮して数学的に正しい結果を得ることから近年世界的に注目を集めている技術であり、対象とするモデル(1)の性質上その正値解が重要となることが多い。国内外の関連する研究では「近似解の数値計算→精度保証」というプロセスの速度向上や、得られる結果の高精度化に焦点が当てられていたが、本研究はそこに正値性の保証という新たな視点を与えることができ、この点において独創的である。本研究で得られたアルゴリズムを用いれば、近似解の近傍に真解の存在性を証明するだけでなく、従来の精度保証技術では成し得なかった符号の保証をすることができ、より高信頼な結果を与えることができる。

研究成果の概要（英文）：This study developed verified numerical computation methods for the following reaction diffusion model
$\partial u/\partial t(t,x) = \triangle u(t,x)+f(x,u(t,x)),\ t\in(0,\infty),\ x\in\Omega$ (1).
More precisely,the study, especially focusing on the stationary problem with respect to (1), developed a numerical method of enclosing positive solutions in the strict mathematical sense. The method ensures the existence of an exact solution of (1) nearby its numerical approximation with strict error bounds,at the same time guaranteeing the positively of the exact solution in the strict mathematical sense.

研究分野：偏微分方程式の数値解析

キーワード：精度保証付き数値計算　反応拡散モデル　偏微分方程式　正値解　計算機援用証明

１．研究開始当初の背景

　精度保証付き数値計算技術は対象とする問題の近似解を求め、その近くに真の解が存在することをコンピュータを用いて証明する。言い換えれば、近似解を$\hat{u}$、誤差上限をrとするときに、真の解を包み込む上界$\hat{u}+r$と下界$\hat{u}-r$を全ての数値計算誤差を考慮した上で厳密に求めるということである（図 1 に概念図を示す）。ここで“精度保証”という言葉には誤差の把握以外に、対象とする問題の解の存在の保証を同時に行うという意味を含み、そのため、数学的立場から“数値的検証法”や“計算機援用(存在)証明”と呼ぶこともある。精度保証付き数値計算は全ての誤差を考慮して数学的に正しい結果を得ることから近年世界的に注目を集めている技術である。

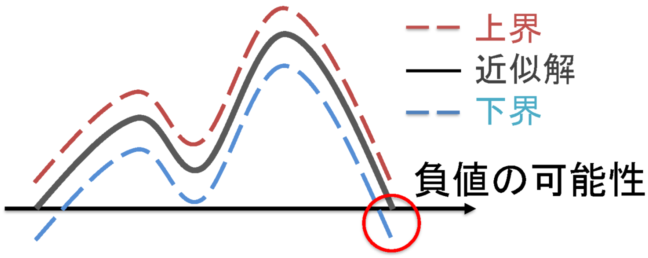


図 1: 精度保証の概念図。簡単のため 1 次元同次ディリクレ境界条件（境界上で値が 0 となるような境界条件）の場合を表している。境界上で丁度 0 となるめ、誤差半径が 0 でない限り真の解が負値となる可能性を否定できない。

　特に研究代表者は以下の反応拡散モデル(1)に関する研究を行っており、物理モデルの性質上、その正値解が重要となることが多い。

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

　例えば物質の濃度を u で表現する場合、解として領域内部で $u>0$ なるものを採用する。重要な境界条件の１つとして例えば同次ディリクレ境界条件（境界上で値が 0 となるような境界条件）が挙げられるが、この場合、図 1 で表されるようにどんなに精度の良い結果が得られたとしても、真の解が正値であるかを判別することができない。即ち、単に近似解と誤差半径を求めるだけでは、本当に必要な解が得られているかどうかが分からないというのが現状である。他の境界条件の場合も、真の解が０に非常に近い場合はその正値性を示すのは同様の理由から困難である。

２．研究の目的

　本研究の目的は反応拡散モデル(1)に対する精度保証付き数値計算を行うことである。特に(1)の正値解を対象とし、その真の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する。即ち、真の解$\boldsymbol{u}$が数値的に求めた近似解$\hat{\boldsymbol{u}}$の付近に存在することを具体的な誤差上限$\boldsymbol{r}$と共に保証し、更に$\boldsymbol{u}$の正値性をも数学的に厳密な意味で保証をするということである。

３．研究の方法

以下の３つの手順で対象とする偏微分方程式の正値解の精度保証付き数値計算を行った。

　手順１：　近似解$\hat{u}$を求める
　手順２：　手順 1 で得た十分に精度の良い近似解$\hat{u}$の近傍に真の解uが存在することを示す
　手順３：　手順 2 で$\hat{u}$の近傍に存在することが保証されたuの正値性を確認する

特に手順 2,3 を成功させるには、手順１で十分に精度の良い近似解$\hat{u}$を求める必要があり、これは汎用的な数値計算ツールでは成し得ない。

手順1：近似解$\hat{u}$を求める

　この手順は通常の数値計算法を用いて行うが、精度保証を成功させるために極めて精度の良い(真の解に十分に近いと思われる)$\hat{u}$ を構成する必要があり、対象とする方程式によって近似解$\hat{u} = \sum_i^N u_i \phi_i$を構成する関数の列$\phi_i$を適切に選ぶ必要があった。

手順2：手順1で得た十分に精度の良い近似解$\hat{u}$の近傍に真の解uが存在することを示す

これを行うには以下で述べる３つの定数K, δ, Lの具体的な値を評価する必要がある。即ち、対象とする方程式の項を全て左辺に移し$\mathrm{F}(u) = 0$と書いたときの以下の３定数である：

1. Fの$\hat{u}$における微分を$\mathrm{F}'[\hat{u}]$と書くとき、その逆作用素のノルム$\|\mathrm{F}'[\hat{u}]^{-1}\| = K$,
2. 残差のノルム$\|\mathrm{F}(\hat{u})\| = \delta$,
3. $\mathrm{F}'[\hat{u}]$のリプシッツ定数L.

このとき、<u>$K^2\delta L \le 1/2$であれば$\hat{u}$の近くに真の解が存在することが保証される</u>。これはニュートン法におけるカントロビッチの収束定理と呼ばれる。一度$K^2\delta L \le 1/2$が満たされれば、具体的な誤差半径$r > 0$が得られ$\|u - \hat{u}\| \le r$を満たす範囲内に真の解uが存在することが示される。

手順3：手順２で$\hat{u}$の近傍に存在することが保証されたuの正値性を確認する。

解の同符号領域のことを Nodal Sets と言う。例えば右の図２は４つの Nodal Sets を持つ解を表している。研究代表者は楕円型作用素の固有値評価理論に基づき、解 u の Nodal Sets の個数の上限を保証する。その個数上限が１であれば、u は領域全体で正値または領域全体で負値ということになる。加えて一点でも$u(x) > 0$となる点が存在すれば u の正値性を証明できる。

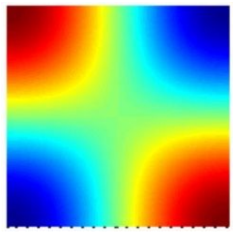


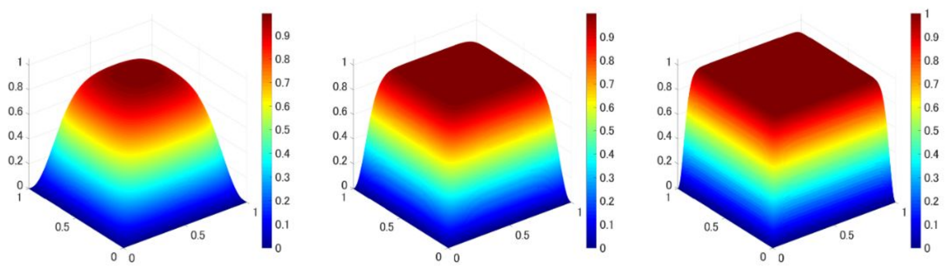
図２: アレン･カーン方程式の近似解を表す。この例では Nodal Sets の数は４である。

４．研究成果

手順1,2を成功させるために、精度良く真の解を近似できる基底としてフーリエ基底(sin 関数や cos 関数で構成される基底)や高次のルジャンドル基底(多項式をグラムシュミット法で直交化した基底)等を用いた。また、そこでKやLの計算には通常の double 精度を用い、δの計算の一部分だけに高精度演算を適用することにより計算時間を短縮し、効率的にδの理論最小値を達成した。

手順３に関して、解uをある固有値問題の固有関数にみなせるというアイディアに基づき、解uの Nodal Sets の個数の上限を保証した。例えば先のアレン・カーン方程式の場合は、解uは固有値問題$(-\Delta + \varepsilon^{-2}(\hat{u})^2)u = \mu u$の$\mu = \varepsilon^{-2}$に対応する固有関数とみなせる。楕円型作用素$-\Delta + \varepsilon^{-2}(\hat{u})^2$の第一固有関数の Nodal Sets の個数上限は１であるので、<u>第一固有値$\boldsymbol{\mu_1}$が$\boldsymbol{\varepsilon^{-2}}$であることを精度保証付き数値計算により示せば良い</u>という結論に至った。即ち、μ_1, μ_2の包含$[\mu_1], [\mu_2]$を得て、$\varepsilon^{-2} \in [\mu_1]$かつ$\varepsilon^{-2} \notin [\mu_2]$であることを示せば良い。十分に精度の良い$\hat{u}$が求められているという条件のもとで、Liu-Oishi の固有値包含理論を応用することにより本目的を達成した。

下記図３は精度保証されたアレン・カーン方程式の近似解を、表１はその精度保証結果を表している。ニュートンカントロビットの定理により、対応する真の解が図示された３つの近似解の近傍に存在することが示されている。また、表１から確認できように$\varepsilon^{-2} \in [\mu_1]$かつ$\varepsilon^{-2} \notin [\mu_2]$であるため、それら真の解の正値性を示すことにも成功している。



$\varepsilon = 0.1$　　$\varepsilon = 0.05$　　$\varepsilon = 0.025$

図 3: アレン・カーン方程式の正値(と思われる)近似解。これら近似解の正値性を示すことができたとしても、その近傍の真の解の正値性は単なる包含の情報だけからは従わない。

表 1: 図 3 の近似解の近傍に存在することが示された真の解の正値性の検証結果。第一固有値のみがε^{-2}を包含していることを確認できる。

ε^{-2}	μ_1	μ_2	μ_3	μ_4	$\cdots$
100	[95.46, 100.1]	[112.1, 118.5]	[112.1, 118.5]	[129.5, 138.1]	$\cdots$
400	[390.0, 400.1]	[402.8, 413.5]	[402.8, 413.5]	[415.8, 427.2]	$\cdots$
	$\mu_1 = \varepsilon^{-2}$	$\mu_k \neq \varepsilon^{-2}$ $(k = 2, 3, 4, \cdots)$			
1600	[1442, 1601]	[1451, 1612]	[1451, 1612]	[1460, 1624]	$\cdots$

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕（計 5 件）

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，日本応用数理学会論文誌，査読有，29 巻，1 号，17-45 , 2019
DOI: https://doi.org/10.11540/jsiamt.29.1_17

② Makoto Mizuguchi, Kazuaki Tanaka, Kouta Sekine, Shin'ichi Oishi: Estimation of Sobolev embedding constant on a domain dividable into bounded convex domains, Journal of Inequalities and Applications, 査読有, 299 , 2017
DOI: https://doi.org/10.1186/s13660-017-1571-0

③ Akitoshi Takayasu, Kaname Matsue, Takiko Sasaki, Kazuaki Tanaka, Makoto Mizuguchi, and Shin'ichi Oishi: Numerical validation of blow-up solutions of ordinary differential equations,Journal of Computational and Applied Mathematics, 査読有, 314, 10-29 , 2017
DOI: https://doi.org/10.1016/j.cam.2016.10.013

④ 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，京都大学数理解析研究所講究録 No.2037，現象解明に向けた数値解析学の新展開 II，査読無, 96-104, 2017
http://www.kurims.kyoto-u.ac.jp/~kyodo/kokyuroku/contents/pdf/2037-13.pdf

⑤ Kazuaki Tanaka, Kouta Sekine, Shin'ichi Oishi: Numerical verification method for positivity of solutions to elliptic equations, RIMS Kôkyûroku No.2037, Numerical Analysis: New Developments for Elucidating Interdisciplinary Problems II, 査読無, 125-140, 2017
http://www.kurims.kyoto-u.ac.jp/~kyodo/kokyuroku/contents/pdf/2037-16.pdf

〔学会発表〕（計 10 件）

① 田中一成: 精度保証付き数値計算を用いた楕円型境界値問題の解の符号変化構造解析，数学と諸分野の連携にむけた若手数学者交流会,2019

② Kazuaki Tanaka, Kazunaga Tanaka: Numerical verification method for elliptic problems with sign change information, The 18th International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic, and Verified Numerical Computations (SCAN2018), 2018

③ Yuta Matsushima, Kazuaki Tanaka, Shin'ichi Oishi: Numerical verification method for positive solutions of Allen-Cahn equation using sub- and super-solution method, The 18th International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic, and Verified Numerical Computations (SCAN2018), 2018

④ Makoto Mizuguchi, Kazuaki Tanaka, Kouta Sekine, Shin'ichi Oishi: Estimation of Sobolev embedding constant on a bounded convex domain, The 18th International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic, and Verified Numerical Computations (SCAN2018), 2018

⑤ 酒井将大，田中一成，大石進一: 半線形楕円型境界値問題の高エネルギー解に対する精度保証付き数値計算，日本応用数理学会 2017 年度連合発表会, 2018

⑥ 松嶋佑汰，田中一成，大石進一: 優解劣解法を用いたアレンカーン方程式の解の精度保証付き数値計算，日本応用数理学会 2017 年度連合発表会,2018

⑦ 田中一成: アレン・カーン方程式の解に対する精度保証付き数値計算，CREST・さき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−，2018

⑧ 若山馨太，金子直樹，田中一成，関根晃太，尾崎克久，大石進一: 前処理ソート付き逐次添加法によるドロネー性保証付き三角形分割法，日本応用数理学会 2017 年度年会，2017

⑨ Shin'ichi Oishi, Kazuaki Tanaka: Computer assisted analysis of stationary problem of Allen-Cahn equation, International Workshop on Industrial Mathematics 2017, 2017.

⑩ Kazuaki Tanaka, Kouta Sekine, Makoto Mizuguchi, Shin'ichi Oishi: Numerical method for estimating the best constant in Sobolev type inequality on unit square, The