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　６ 年　６ 月 ２４ 日現在

機関番号：１７２０１
研究種目：基盤研究(C)（一般）
研究期間：2020～2023
課題番号：２０Ｋ０３７５２

研究課題名（和文）偏微分方程式と有限要素近似に関する精度保証付き数値計算法の発展とその自動化の研究

研究課題名（英文）Numerical Verification Methods for the Finite Element Approximation of Partial Differential Equations

研究代表者
木村　拓馬（Kimura, Takuma）

佐賀大学・理工学部・准教授

研究者番号：６０５８１６１８

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　2,500,000円

研究成果の概要（和文）：　本研究課題は，偏微分方程式の厳密解の存在範囲もしくは一意存在の範囲を，計算機を用いて自動的に求める精度保証付き数値計算法の研究を行うものである．
　主に時間発展をともなう放物型偏微分方程式の周期境界値問題を対象として研究を進めた．まず，基本解行列の厳密計算を応用した数値解の誤差評価手法の改良を行い，論文１篇が国際的な査読付き学術誌に掲載された．そして，空間方向に有限要素法を時間方向にスペクトル法を用いて得られる数値解について誤差評価手法を導出し，査読付き国際会議発表を１件行った．なお，論文１篇を国際的な査読付き学術誌に投稿中であり，それはプレプリントサーバにて公開されている．

研究成果の学術的意義や社会的意義
　計算機を用いた数値計算は非常に有用であるが，しかし一般に，数値計算によって得られる計算結果は誤差を含む．そこで，その精度を計算機を用いて検証する手法が活発に研究されている．
　本研究で扱う有限要素法などの離散化手法は，学術研究だけでなく産業や経済などの多くの問題にも広く応用可能と考えられる．
　本研究の成果は，有限要素法などを用いて微分方程式の解を数値計算する際の誤差評価を計算機自身が行うものであり，計算機による計算結果に信頼性を与える精度保証付き数値計算法の適用範囲の拡大につながり，計算機技術の更なる発展へ寄与できる成果といえる．

研究成果の概要（英文）：This research aims to develop new numerical verification methods for solutions of partial differential equations. The study has a primary focus on the periodic boundary value problems of parabolic partial differential equations with the time evolution. We have developed constructive a priori error estimates for a fully discrete numerical solution of the heat equation, which refine our previous work through the application of the exact computation of the fundamental solution.
Additionally, we have established constructive error estimates for a full-discretized periodic solution of heat equation by spatial finite-element and time spectral method.

研究分野：応用数学

キーワード：精度保証付き数値計算　有限要素法　微分方程式　発展方程式　誤差評価　数値的検証法　数値計算　数値解析

様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１（共通）

１.　　研究開始当初の背景

一般に，計算機を用いた数値計算によって得られる数値解は誤差を含む．計算が複雑になるほどに誤差が積み重なる可能性があり，誤差の検証が出来なければ計算結果は信頼できない．そこで，「与えられた問題（数学モデル）の解の存在範囲もしくは一意存在の範囲を丸め誤差の厳密評価を含めて特定する」精度保証付き数値計算法が活発に研究されている．

数値計算モデルと数値モデルの誤差評価については，充分に基礎研究が行われ，実用の域に達している．例えば，数値の丸め誤差については規格をみたす数値と実数との違いを理論的・機械的に評価でき，打切り誤差についてはTaylorの定理や各種不動点定理によって数値解と厳密解との距離を導出すればよい．

そして離散化誤差，特に本研究課題の対象とする微分方程式については，有限要素法を基礎とした“中尾の方法”と呼ばれる解の存在証明と誤差評価の手法が確立されつつある．境界値問題についてはさまざまな方法が提案されており，近年は初期値問題や周期境界値問題についても研究が進んでいる．

研究代表者も，有限次元問題の精度保証付き数値計算法と，無限次元問題の中尾の方法についていくつかの手法を提案するとともに数値実験を行っている．

２．研究の目的

本研究は，偏微分方程式の“厳密解”の存在範囲もしくは一意存在の範囲を，計算機を用いて自動的に求める精度保証付き数値計算法の開発を目的とするものである．特に放物型偏微分方程式の周期境界値問題を対象とし，その適用範囲を拡大するとともに，計算精度の向上を目指す．具体的には，以下の２つを到達目標とする．

(1)　基本解行列の厳密計算を応用した偏微分方程式の解の存在証明手法の改良

(2)　解の存在証明とともに有限要素近似解の誤差評価も行う手法の導出

計算機を用いた計算手法についても検討し，高精度に，少ない計算量・記憶領域量で検証できるように，効率的な計算機援用証明・誤差評価手法の考案を目指す．このとき，現状では扱う問題ごとに少々複雑で独特な計算を必要とする場合が多くあるため，計算機が自動的に計算機援用証明・誤差評価を行う方法の開発もあわせて行う．

３．研究の方法

研究代表者やその関係者らに蓄積された知見と技術を活かし，その応用・発展によって得られる独自の手法の開発を目指して研究を行った．

まず，基本解行列の厳密計算を応用した偏微分方程式の解の存在証明手法について，研究代表者がこれまでに得た知見をまとめ改良を行った．研究代表者らはこれまでに，放物型偏微分方程式の初期値境界値問題について空間方向は有限要素法，時間方向は基本解行列による補間を用いる場合の数値解に対する手法を提案し，さらにその応用により，周期境界値問題に対する手法も提案している．これは周期条件をみたす特別な初期値問題を考えて初期値境界値問題に対する手法を応用・拡張し得られたものであり，その後の研究により改良の余地があることがわかった．そこで，初期値問題に対する定理の応用をやめ，周期条件を用いて初めから証明しなおすことで，これまでの成果よりも理論的に高精度なシンプルな事前誤差評価式が導出できた．また，初期値問題に対する手法と初期値に対する評価とを組み合わせることで，ある時刻における誤差のノルム評価という意味でのpointwise な誤差評価式が導出できた．

つぎに，フーリエ展開の厳密計算を用いて偏微分方程式の解の存在証明や誤差評価を高精度に行う手法について検討した．研究代表者らはこれまで，時間方向の離散化を高精度かつ少ない計算量・記憶領域量で扱うための手法を検討してきた．具体的には，時間方向・空間方向ともに有限要素法を用いた数値解や，空間方向は有限要素法のまま時間方向は基本解行列による補間を用いる場合の数値解に対する手法を提案している．結果として，空間方向は有限要素法のまま時間方向にスペクトル法を用いた場合の数値解に対して，実際の誤差と同じオーダーで誤差評価できるという意味でのオーダー最良な誤差評価を行うことができた．

研究の各段階で適宜に数値実験を行い，その結果を理論構築にフィードバックし再度実験・理論構築を行うことで，計算機への実装をも考慮した実用的・効率的な理論構築と数値実験を行った．計算機への実装においては，数式処理を用いて，有限要素法における微分積分を計算機が自動的に行うことを検討した．

４．研究成果

以下の成果が得られた．

(1) 基本解行列の厳密計算を応用した偏微分方程式の解の存在証明手法の改良を行い，シンプルでありかつ既知の手法よりも精度が良いことが理論的にいえるような事前誤差評価式を導出した．さらに，ある時刻における誤差のノルム評価という意味での pointwise な誤差評価式を導出した．この成果について，論文一篇が国際的な査読付き学術誌 Computational Methods in Applied Mathematics に掲載受理された．

(2) 線形熱方程式の周期境界値問題について，時間方向の離散化にフーリエ展開を用いることで，ある種の数値解に対して実際の誤差と同じオーダーで誤差評価ができるという意味でのオーダー最良な誤差評価手法を導出した．この成果について，査読付き国際会議 ICIAM（10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics）にて，フーリエ展開を用いる誤差評価手法など未発表の情報を含む本研究課題の成果に関する査読付き口頭発表一件を行った．また，国際的な査読付き学術誌に論文一篇を投稿中である．この論文は査読中であるが，プレプリントサーバＳＳＲＮ にて公開されている．

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕　計2件（うち査読付論文　1件／うち国際共著　0件／うちオープンアクセス　1件）

１．著者名 Takuma Kimura, Teruya Minamoto, Mitsuhiro T. Nakao	４．巻 22
２．論文標題 Improvement of the Constructive A Priori Error Estimates for a Fully Discretized Periodic Solution of Heat Equation	５．発行年 2022年
３．雑誌名 Computational Methods in Applied Mathematics	６．最初と最後の頁 631～647
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1515/cmam-2022-0015	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

１．著者名 Kimura Takuma、Minamoto Teruya、Nakao Mitshuhiro　T.	４．巻 -
２．論文標題 Constructive Error Estimates for a Full-Discretized Periodic Solution of Heat Equation by Spatial Finite-Element and Time Spectral Method	５．発行年 2024年
３．雑誌名 SSRN	６．最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.2139/ssrn.4837039	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 －

〔学会発表〕　計1件（うち招待講演　0件／うち国際学会　0件）

１．発表者名 Takuma Kimura, Teruya Minamoto, Mitsuhiro T. Nakao
２．発表標題 [04568] Constructive error estimates for a full-discretized periodic solution of heat equation
３．学会等名 ICIAM (10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics)
４．発表年 2023年

〔図書〕　計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

－

６．研究組織

	氏名 （ローマ字氏名） （研究者番号）	所属研究機関・部局・職 （機関番号）	備考

７．科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕　計0件

８．本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関