

令和 3 年 5 月 18 日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2017～2020

課題番号：17K14241

研究課題名(和文)ポテンシャル論に基づく超高性能数値計算法の統一的設計

研究課題名(英文)Versatile construction of highly accurate numerical methods based on potential theory

研究代表者

田中 健一郎(Tanaka, Ken'ichiro)

東京大学・大学院情報理工学系研究科・准教授

研究者番号：70610640

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：いくつかの関数空間の設定のもとで、関数近似法や数値積分法を設計する方法を確立した。このために、標本点を得る最適化問題を設定した。数値解析学の分野では、個別の状況に応じて様々な近似公式の構成法が知られているが、本研究は、性質の良い公式の汎用的構成法を得ることを目指したものである。本研究では、ポテンシャル論におけるエネルギー最小化問題との関連を明らかにし、その関係を有効に利用している。

研究成果の学術的意義や社会的意義

関数近似法や数値積分法は、様々な科学技術計算だけでなく、データ科学や統計的学習理論などとの関係が深い。数値解析学の分野では、様々な近似公式の構成法が知られているが、それらは個別の設定に応じて数学的工夫を凝らした方法となっており、最適な近似を得る汎用的原理の解明は難しい問題である。本研究は、道半ばではあるものの、この汎用的原理の解明に向けていくつかの成果を得たものと言える。

研究成果の概要(英文)：By setting some function spaces, we have established methods for constructing formulas for function approximation or numerical integration. For this purpose, we set some mathematical optimization problems providing sampling points for the formulas. In numerical analysis, various methods for constructing approximation formulas are known according to specific situations. In this study, we pursued a versatile framework for constructing formulas with good properties. We revealed a relationship between the construction problems and energy minimization problems in potential theory and used the relationships effectively.

研究分野：数値解析学

キーワード：重み付きハーディ空間 ポテンシャル論 関数近似公式 数値積分公式 凸エネルギー最小化問題 再生核ヒルベルト空間

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

現代の科学・工学では解析関数に対する数値計算法は重要であり、中でも数値積分と関数近似は基盤的技術である。数値積分については、我が国を中心に開発された二重指数関数型 (DE) 公式が著名であり、その準最適性も知られていた。これは、DE 型の変数変換 (DE 変換) により被積分関数を急激に減衰させることで、高精度公式を実現したものであった。また、関数近似についても、DE 型の変数変換と sinc 関数による補間を組み合わせることで、DE-Sinc 公式と呼ばれる準最適な高精度公式が考案されていた。

しかし、真の最適公式や、それらを設計する一般原理は未解明であり、理論・実用の観点からその解明が待たれていた。これに対し、研究代表者は、関数近似について、最適公式をポテンシャル論を用いて特徴づけ、DE-Sinc を超える高精度近似を実現した。ただし、その構成法や理論的解析、応用についてはまだ発展の余地が多く残されていた。

2. 研究の目的

本研究では、前述の関数近似公式の構成法を改良したり精緻な理論的解析を与えたりすると共に、他の数値計算法への応用することを目的とした。特に、数値積分についても最適公式を追究し、より高精度な数値計算法の統一的設計を目指した。さらに、これらの方法を各種の数値計算法へと展開することも目標とした。

3. 研究の方法

本研究の下地として、研究代表者がポテンシャル論に基づいて構成した関数近似公式があった。ここでは、DE 変換などの変数変換により得られる実軸上の減衰関数からなる関数空間 (重み付きハーディ空間) を設定し、その空間における n 点補間による近似の最悪誤差を表す指標を考察の対象とした。そして、これがある種のポテンシャルで書けることに着目した。そこで、この最悪誤差を達成する公式を求める問題をポテンシャル論を用いて定式化し、その問題を解けば公式が設計できるだろうという着想に至った。そして、この問題に対する近似解法を考案することで、代表的な既存手法である DE-Sinc 法を超える関数近似公式の設計に成功した。

そこで本研究では、ポテンシャル論に基づいたある種のエネルギー最小化問題を解くことにより、各種数値計算法を構成することを目指した。より具体的には、外部場付きグリーンエネルギー最小化問題を解くことによって補間に用いる標本点を生成し、公式を構成する方法を追求することを目指した。

4. 研究成果

(1) 重み付きハーディ空間における高精度な関数近似公式の設計方法の改良。

研究開始当初は、前述のエネルギー最小化問題を解く際、ポテンシャル論から導かれるある積分方程式を近似的に解く方法を考察していた。この方法は複雑である上、途中で近似精度の評価が難しい直感的な近似方法を用いていたため、理論的な正当性を示すのが困難であった。

それに対して本研究では、性質の良い標本点を直接与える最適化問題を考えることで、既存の方法と同程度の精度を持つ公式を、より簡単に構成することに成功した。その最適化問題は有限個の標本点に対する凸最小化問題であり、効率的に数値解を求めることができる。また、この改良に加えて、補間による関数値計算を効率化するため、補間公式に対する性質の良い表示を与えることにも成功した。これは、通常の多項式補間については良く知られている重心型公式 (barycentric formula) の類似と見なすことができ、実際の数値実験においても、以前の表示を用いた場合に比べて高速な計算が可能になった。この結果は論文誌に採択・掲載されている。

また、この簡便な凸最小化問題による関数近似公式に関して、指導学生との共同研究によって、精緻な精度解析を与えることに成功した。この公式はポテンシャル論の結果をもとに、ある種のエネルギー最小化問題によって標本点を定めることで構成されていたが、その精度の数学的評価に成功したということである。この評価においては、エネルギー最小化問題に対する双対性理論が重要な役割を果たした。

(2) 特別な場合における、関数近似公式の標本点の明示的構成。

前述の関数近似公式に関して、変数変換後の関数の減衰度がある一定の条件を満たす場合を考察した。この場合に、前述の凸最小化問題によらず、関数近似に用いる補間のための標本点を

数学的に閉じた式で与えられることを示した。さらに、その標本点を用いて構成した公式の精緻な収束解析も行うことができた。この場合は、構成した公式が真に最適であることの保証も得られている。以上の結果も、論文誌に採択・掲載されている。

(3) 重み付きハーディ空間における高精度な数値積分公式の設計。

前述の関数近似公式の構成法および評価は、類似の方法で構成した数値積分公式の評価にも利用できる。本研究では、以前に研究代表者らが得ていた、重み付きハーディ空間における n 点数値積分公式の最悪誤差の表示式を、考察の対象とした。まず、研究開始初年度の前年度までに得られていた結果の詳細を固め、その内容に関する論文を国際会議の査読付きプロシーディングスから出版した。その論文では、最悪誤差の表示式がやはりポテンシャルを用いて書いていることを用いて、その表示式を近似的に最小化することで標本点を求めるという内容を述べている。そして、その標本点に合わせて重みを適切に定めることで、DE 公式を超える精度を達成する数値積分公式を達成することができている。これに続いて、本研究では、指導学生との共同研究により、公式の精度の数学的評価を与えた。この成果も論文誌に掲載されている。

(4) 多変数関数に対する近似公式の最適化法による構成。

以上においては、一変数解析関数の近似や数値積分を対象としていたが、本研究では、多変数関数にも研究対象の範囲を拡大し、いくつかの成果を得た。これらは、当初は想定していなかった成果と言える。多変数関数の近似や数値積分は、様々な科学技術計算だけでなく、データ科学や統計的学習理論などとの関係が深いことが以前から知られている。そのため、このように研究範囲を拡大することが適切であろうと考えた。

多変数関数の場合には、前述の変数変換型の近似公式に対応する関数空間の設定を、そのまま適用することは難しい。そこで、対象とする関数空間についてまずは検討した。対象とする関数空間は、特殊すぎず、かつ、関数近似や数値積分の最悪誤差の表示が比較的容易に得られるものであることが望ましい。そこで、本研究では、再生核ヒルベルト空間を考察の対象とした。これは、機械学習分野や準モンテカルロ法の分野でもこれまで良く用いられてきたものである。再生核ヒルベルト空間では、関数近似や数値積分の最悪誤差の表示が、近似に用いる標本点の関数として比較的容易に得られることが知られている。ただし、それらを標本点について最適化する問題は凸性のような良い性質を持たず、難しい。これらの問題に対して、これまでいくつかの最適化算法が考案されているが、いずれも、最適性の保証や算法の効率性の問題について研究の余地があるのが現状である。

そこで本研究では、これらの問題に取り組んだ。まずは、関数近似について、指導学生との共同研究で、簡易的な貪欲算法の提案と解析を行った。この結果は論文誌に掲載されている。ただし、この方法は効率的に解ける最適化問題を提案するものではなかった。その後、関数近似の最良誤差の表示に現れる、ある行列式の最大化を考察する方針をとった。この問題は実験デザイン分野で知られている問題に近く、ある種の近似を用いることによって、二次錘計画問題に帰着されることが分かった。これは凸最適化問題であり、汎用ソルバーで数値解を求めることができる。これにより、性質の良い標本点を生成できることが分かった。この結果も論文誌に掲載されている。ただし、高次元の問題になると解くべき問題の規模が急激に巨大になるため、今後さらに改善する余地が残っている。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計8件（うち査読付論文 6件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Hiroaki Hirano, Ken'ichiro Tanaka	4. 巻 11
2. 論文標題 Generation of collocation points in the method of fundamental solutions for 2D Laplace's equation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 JSIAM Letters	6. 最初と最後の頁 49-52
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.14495/jsiaml.11.49	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 Ken'ichiro Tanaka	4. 巻 -
2. 論文標題 Generation of point sets by convex optimization for interpolation in reproducing kernel Hilbert spaces	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Numerical Algorithms	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) 10.1007/s11075-019-00792-w	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 Ken'ichiro Tanaka, Tomoaki Okayama, Masaaki Sugihara	4. 巻 234
2. 論文標題 An optimal approximation formula for functions with singularities	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Approximation Theory	6. 最初と最後の頁 82-107
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jat.2018.06.004	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 Ken'ichiro Tanaka, Masaaki Sugihara	4. 巻 -
2. 論文標題 Design of accurate formulas for approximating functions in weighted Hardy spaces by discrete energy minimization	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 IMA Journal of Numerical Analysis	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) 10.1093/imanum/dry056	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 Ken'ichiro Tanaka, Tomoaki Okayama, and Masaaki Sugihara	4. 巻 1
2. 論文標題 Potential Theoretic Approach to Design of Accurate Numerical Integration Formulas in Weighted Hardy Spaces	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Approximation Theory XV: San Antonio 2016	6. 最初と最後の頁 335-360
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-319-59912-0_17	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 Hayakawa Satoshi, Tanaka Ken'ichiro	4. 巻 12
2. 論文標題 Error bounds of potential theoretic numerical integration formulas in weighted Hardy spaces	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 JSIAM Letters	6. 最初と最後の頁 21 ~ 24
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.14495/jsiaml.12.21	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 Karvonen Toni, S?rkk? Simo, Tanaka Ken'ichiro	4. 巻 87
2. 論文標題 Kernel-based interpolation at approximate Fekete points	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Numerical Algorithms	6. 最初と最後の頁 445 ~ 468
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11075-020-00973-y	査読の有無 無
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 Oshiro Ryunosuke, Tanaka Ken'ichiro	4. 巻 12
2. 論文標題 Effective methods for obtaining good points for quadrature in reproducing kernel Hilbert spaces	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 JSIAM Letters	6. 最初と最後の頁 61 ~ 64
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.14495/jsiaml.12.61	査読の有無 無
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 -

〔学会発表〕 計13件（うち招待講演 1件 / うち国際学会 3件）

1. 発表者名 Ryunosuke Oshiro, Ken'ichiro Tanaka
2. 発表標題 Point-exchanging methods for obtaining kernel quadrature formula
3. 学会等名 16th International Conference on Approximation Theory (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 早川 知志, 田中健一郎
2. 発表標題 双対性による関数近似公式および数値積分公式の収束解析
3. 学会等名 日本応用数理学会 2019年度 年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 田中健一郎
2. 発表標題 解析関数に対する最良近似の評価および数値最適化による近似公式の構築
3. 学会等名 日本数学会 2019年度秋季総合分科会 応用数学分科会 特別講演 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 平井広志, 大城隆之介, 田中健一郎
2. 発表標題 有理凸多面体に含まれる整数点の数え上げの数値積分からのアプローチ
3. 学会等名 日本オペレーションズ・リサーチ学会 研究部会 最適化とその応用: 未来を担う若手研究者の集い 2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Ken'ichiro Tanaka
2. 発表標題 Generation of good point configurations by global optimization for interpolation in reproducing kernel Hilbert spaces
3. 学会等名 13th SIAM East Asian Section Conference 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 田中健一郎
2. 発表標題 再生核ヒルベルト空間における関数近似のための標本点生成法について
3. 学会等名 日本応用数理学会 2018年度 年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 平野 広明, 田中健一郎
2. 発表標題 代用電荷法におけるFekete点の近似
3. 学会等名 日本応用数理学会 2018年度 年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Ken'ichiro Tanaka, Masaaki Sugihara
2. 発表標題 Energy Minimization for Approximating Analytic Functions
3. 学会等名 The 16th International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics (ICNAAM 2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 大城 隆之介, 田中 健一郎
2. 発表標題 ポテンシャルを利用した再生核ヒルベルト空間上の積分公式の設計
3. 学会等名 2018年度 応用数学合同研究集会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 京谷 駿希, 田中 健一郎
2. 発表標題 等角写像による二重指数関数型数値積分公式の改良
3. 学会等名 日本応用数理学会 2019年 研究部会連合発表会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大城 隆之介, 田中 健一郎
2. 発表標題 再生核ヒルベルト空間に属する関数に対する点交換による求積公式の設計
3. 学会等名 日本応用数理学会 2019年 研究部会連合発表会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 平野 広明, 田中 健一郎
2. 発表標題 離散エネルギー最小化による重み付き多項式補間の構成
3. 学会等名 日本応用数理学会2018年研究部会連合発表会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Ken' ichiro Tanaka
2. 発表標題 Generation of point sets by global optimization for kernel-based numerical integration.
3. 学会等名 "Probabilistic Numerical and Kernel-Based Methods", Special Session at Data-Centric Engineering Reading Group at The Alan Turing Institute, London, UK. August 5, 2020 (ONLINE)
4. 発表年 2020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		
フィンランド	Aalto university		