様式 C-19

科学研究費補助金研究成果報告書

平成 20 年 3 月 16 日現在

研究種目：基盤研究（C）
研究期間：2006～2008
課題番号：１８５４０１２４
研究課題名（和文） 発展方程式に対するスペクトル選点法の応用とその数値安定性に関する研究
研究課題名（英文） Stability of the spectral collocation method for evolution equations

研究代表者
竹内 敏己（TAKEUCHI TOSHIKI）
徳島大学・大学院ｿｼｵﾃｸﾉｻｲｴﾝｽ研究部・教授
研究者番号：３０２６４９６４

研究成果の概要：熱伝導方程式の逆問題に対して空間、時間ともにスペクトル選点法を適用して離散化した場合の時間発展に対する数値安定性の研究を行った。逆問題では解も指数的に増大するため、解の増大度に対する誤差の増大度を表す相対安定性を定義し、離散化行列の固有値を計算することにより安定領域を調べた。その結果、スペクトル選点法の次数に応じて時間刻みをある程度大きく取れば安定に数値計算が行えるという結果が得られた。

交付額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合　計
２００６年度	1,900,000	0	1,900,000
２００７年度	700,000	210,000	210,000
２００８年度	900,000	270,000	270,000
年度			
年度			
総　計	3,500,000	480,000	3,980,000

研究分野：数物系科学
科研費の分科・細目：数学・数学一般（含確率論・統計数学）
キーワード：安定性、発展方程式、スペクトル選点法、逆問題、熱伝導方程式

１．研究開始当初の背景

(1) 発展方程式の数値計算においては、時間に対する離散化手法が重要である。問題の性質によっては、数値不安定となり数値計算が発散してしまうことが多々ある。例えば、逆問題の数値計算において、空間を２次中心差分法、時間を１次の陽的オイラー法を用いて離散化した場合、数値計算は不安定となることが証明されている。実際の数値計算においても、数値解はすぐに振動を始めてしまい、近似解を得ることはできない。これに対しては、問題の正則化を行ったり、順問題の最適化問題に変更したりして振動現象を押さえるための工夫をする。しかし、それでも満足のいく数値計算結果が得られないことが多い。

(2) 一方、打切り誤差を任意に小さくする手法であるスペクトル選点法と丸め誤差を任意に小さくする手法である多倍長計算を組み合わせた数値計算手法、IPNS(Infinite-Precision Numerical Simulation) は、直接的な数値計算手法であるにもかかわらず、逆問題に対して有効な手法であることが示されている。

(3) 時間に対してスペクトル選点法を適用する場合、時間発展させないである一定時間を一気に計算するという方法を取ることが多いが、こ

の方法では一定の精度の数値解を得るために多くの選点が必要となる。また、選点の増加に伴って多倍長実数の桁数も多く必要になり、計算は大規模なものとなり、時間がかかる。そこで、比較的小規模な計算でも長時間の数値計算が行える手法の開発が必要となる。

2．研究の目的

(1) 本研究は、発展方程式において、逆問題のような数値不安定になりやすい問題に対しても安定して高精度な数値計算ができる手法を開発することを目的とする。
(2) 本研究では、数値計算法としてスペクトル選点法を用いる。偏微分方程式に対して数値計算を行う場合、空間だけでなく時間に対してもスペクトル選点法を用いる。さらに、一定時間までの数値計算を行う場合、時間に対しても等分割し、時間刻みを定めて個々の時間に対してスペクトル選点法を適用する。これは、長い時間までの計算が必要な場合でも、スペクトル選点法で用いる選点をそれほど多く使わず、比較的小規模の数値計算で計算を実行するという目的のためである。
(3) このためには、発展方程式をスペクトル選点法を用いて離散化した場合の数値安定性の解析が必要となる。差分法等の通常用いられる方法では、逆問題の数値解析は不安定となることが知られているが、経験上スペクトル選点法を用いた場合には、安定に計算を行えるケースがあることがわかっている。本研究では、数値計算が安定であるための条件を研究し、実際に安定な数値計算を行うことを目的とする。

3．研究の方法

(1) モデル問題として、熱伝導方程式の逆問題を取り上げ、空間、時間共にスペクトル選点法を用いた場合の安定性についての研究を行う。スペクトル選点法では、選点の種類にバリエーションがあるが、本研究では境界条件の処理が容易に行えるチェビシェフ選点法を用いる。まず、実際の数値計算において、スペクトル選点法の次数及び時間刻みの幅を変更して、数値計算を行い、計算が安定に行える領域があることを確認し、安定条件について数値的におおまかな条件を調べる。
(2) 次に、実際に離散化で得られる行列についての性質を研究する。数値計算が安定かどうかを調べるためには離散化行列の固有値を調べる必要がある。本研究では、空間変数についてもスペクトル選点法を用いて離散化を行うので、空間変数、時間変数に対するそれぞれのスペクトル選点法の次数及び時間刻みの幅等様々な値の組み合わせについて、離散化行列の固有値を求めることにより安定条件を正確に求める。その結果を元に、実際の数値計算で安定に計算が行えることを実証する。

4．研究成果

(1) 本研究で扱う方程式と離散化手法

本研究では、下記の熱伝導方程式の逆問題を扱った。

<u>問題 1</u>　次を満たす $u=u(x,t)$ を求めよ。

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial u}{\partial t} &= -\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, && 0<t, && -1<x<1,\\
u(x,0) &= \cos\frac{\pi x}{2}, && && -1<x<1,\\
u(-1,t) &= 0, && 0 \leqq t, &&\\
u(1,t) &= 0, && 0 \leqq t. &&
\end{aligned}
$$

問題 1 の厳密解は次の通りである。解は時間変数 t に関して指数的に増大する。

$$u(x,t)=\exp\frac{\pi^2 t}{4}\cos\frac{\pi x}{2},\quad 0\leqq t,\quad -1\leqq x\leqq 1.$$

時間変数に対してスペクトル選点法を適用するために、時間刻みを Δt とし、区間 $[t_s,t_e]$ ($t_e=t_s+\Delta t$) に対して、次の変数変換 ($t\to\tau$) を行う。

$$t(\tau)=\frac{\Delta t}{2}\tau+\frac{1}{2}(t_s+t_e),\quad -1\leqq\tau\leqq 1.$$

この変換を用いて、問題 1 は次の問題 $1'$ に変換される。

<u>問題 $1'$</u>　次を満たす $\tilde{u}=\tilde{u}(x,\tau)$ を求めよ。

$$\frac{2}{\Delta t}\frac{\partial\tilde{u}}{\partial\tau}=-\frac{\partial^2\tilde{u}}{\partial x^2},\quad -1<\tau\leq 1,\quad -1<x<1,$$

$$\tilde{u}(x,-1)=\begin{cases}\cos\dfrac{\pi x}{2}, & t_s=0,\\ u(x,t=t_e'), & t_s>0,\end{cases}\qquad -1<x<1,$$

$$
\begin{aligned}
\tilde{u}(-1,\tau) &= 0, && -1<\tau<1,\\
\tilde{u}(1,\tau) &= 0, && -1<\tau<1.
\end{aligned}
$$

ここで、区間 $[t_s',t_e']$ は区間 $[t_s,t_e]$ の直前の区間とする (すなわち $t_s=t_e'$)。

問題 1′ に対して、空間、時間共にスペクトル選点法を用いて離散化を行った場合の時間発展に対する数値安定性を調べた。

(2) 数値実験と離散化行列のスペクトル半径

問題 1′ にスペクトル選点法を適用し、いくつかの Δt に対して数値実験を行った。空間及び時間に対するスペクトル選点法の次数を N とし、時間発展を 100 ステップ行った時の数値計算結果を表 1 に示す。数値計算はすべて 4 倍精度実数を用いて行った。数値計算結果は、数値解と厳密解の相対誤差の絶対値の最大値 ε で評価した。参考までに厳密解の最大値 $u(0,t)$ の値も表に掲載する。

表 1　$N = 20$ の場合の数値計算結果

Δt	ε	$u(0,t)$
1.0	3.01×10^{574}	1.44×10^{107}
2.0	1.37×10^{525}	2.07×10^{214}
3.0	1.97×10^{197}	2.98×10^{321}
4.0	7.01×10^{-7}	4.28×10^{428}
5.0	3.31×10^{-4}	6.16×10^{535}

$\Delta t = 1.0,\ 2.0,\ 3.0$ では、全く近似解が得られていないのに対し、$\Delta t = 4.0,\ 5.0$ では、解が数百桁の大きさにもかかわらず安定に計算できていることがわかる。

次に、この現象を解析するために、離散化方程式における係数行列の性質を調べた。問題 1′ に対する、離散化方程式は次の形に表すことが出来る。

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ O & O & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u_1} \\ \mathbf{u_2} \\ \mathbf{u_3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{u}_1^{(\mathrm{old})} \end{pmatrix}$$

ここで、各区間 $[t_s, t_e]$ において、$\mathbf{u_1}$ は $t = t_e$ における変数の列ベクトル、$\mathbf{u_2}$ は $t_s < t < t_e$ における変数の列ベクトル、$\mathbf{u_3}$ は $t = t_s$ における変数の列ベクトルを表す。また、$\mathbf{u}_1^{(\mathrm{old})}$ は、直前の時間ステップの $t'_e (= t_s)$ における変数の列ベクトルを表す。ここで、

$$\begin{aligned} S =& (I - A_{11}^{-1} A_{12} A_{22}^{-1} A_{21})^{-1} \\ & (A_{11}^{-1} A_{12} A_{22}^{-1} A_{23} - A_{11}^{-1} A_{13}) \end{aligned}$$

とおくと、

$$\mathbf{u_1} = S\, \mathbf{u}_1^{(\mathrm{old})}$$

と書くことができる。この行列 S が時間発展における行列となる。通常の安定性の場合、数値計算が安定となるためには、行列 S の固有値の絶対値最大の値を表す S のスペクトル半径 $\rho(S)$ が 1 未満となることが必要である。実際に、$N = 20$ の場合に、表 1 の各 Δt に対して行列 $\rho(S)$ の値を求めた結果を表 2 に示す。また、Δt の値を 10 まで変化させたときの $\rho(S)$ の値の変化のグラフを図 1 に示す。

表 2　$N = 20$ の場合の $\rho(S)$

Δt	$\rho(S)$
1.0	1.140×10^{7}
2.0	4.968×10^{7}
3.0	3.013×10^{5}
4.0	1.933×10^{4}
5.0	2.280×10^{5}

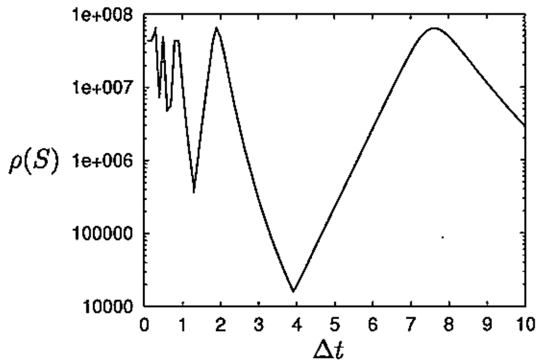

図 1　$N = 20$ の場合の $\rho(S)$　$(\Delta t \leqq 10)$

いずれの Δt に対しても $\rho(S) > 1$ であり、数値実験結果を反映していない。

(3) 相対安定性と安定領域

表 2 の結果が数値実験結果と異なる理由を考察する。問題 1 の厳密解は指数的に増大するため、数値誤差の成長率が厳密解の成長率より小さい場合は、通常の順問題のケースとは異なり数値計算は安定と判断できる。そこで、時間発展 1 ステップあたりの解の成長率である

$$\lambda = \frac{\exp \dfrac{\pi^2 (t + \Delta t)}{4}}{\exp \dfrac{\pi^2 t}{4}} = \exp \frac{\pi^2 \Delta t}{4}$$

を考え、係数行列のスペクトル半径 $\rho(S)$ を λ で割った相対安定性 $\rho_\lambda(S)$ を定義する。すなわち、

$$\rho_\lambda(A) = \frac{\rho(A)}{\lambda}$$

と定義する。この定義に従って、$N = 20$ の場合の相対安定性の計算を行った。結果を表 3 及び図 2 に示す。

表 3　$N = 20$ の場合の $\rho_\lambda(S)$

Δt	$\rho_\lambda(S)$
1.0	9.660×10^5
2.0	3.573×10^5
3.0	1.837×10^2
4.0	0.999999993
5.0	0.999997

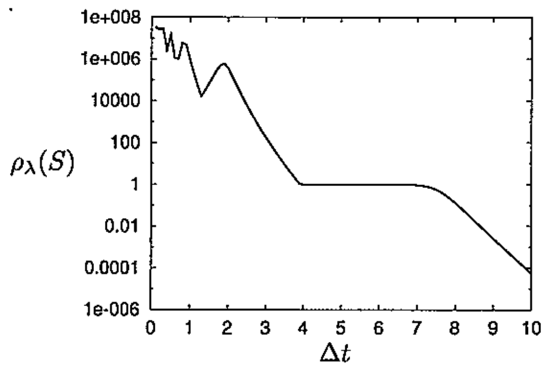

図 2　$N = 20$ の場合の $\rho_\lambda(S)$ $(\Delta t \leqq 10)$

$\Delta t \geqq 4$ のとき、$\rho_\lambda(S) < 1$ であり、数値計算結果とも一致していることがわかる。

他の N に対しても計算を行ったが、$N = 20$ の場合と概ね同様の結果が得られた。すなわち、スペクトル選点法の次数を固定して時間刻み Δt を変えた場合、ある値を超えると相対安定となる、という結果が得られた。

最後に、いくつかの N に対し、相対安定 $(\rho_\lambda(S) < 1)$ となる最小の Δt に対して、実際に数値計算を行った結果を示す。数値計算はすべて 4 倍精度実数を用いて行い、時間発展を 100 ステップ行った時点での相対誤差の最大値 (ε) を求めた。結果を表 4 に示す。

表 4　いくつかの N に対する数値計算結果 (ε)

N	Δt	100 ステップ
4	0.6	5.72×10^{-1}
8	1.9	1.67×10^{-1}
12	2.3	3.47×10^{-4}
16	3.5	1.56×10^{-4}
20	5.3	1.76×10^{-4}
24	4.8	2.30×10^{-8}
28	5.6	7.67×10^{-10}
32	7.7	7.53×10^{-8}

N が大きくなると共に、相対安定となる最小の Δt も大きくなるが、必ず存在することがわかる。また、N が大きくなると相対誤差が小さくなり、精度の高い数値計算が可能であることがわかる。以上により、熱伝導方程式の逆問題に対して本研究の数値計算手法を用いれば、安定な数値計算が行えることがわかる。

5．主な発表論文等

（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計 3 件）

① Hedio Sakaguchi, Hitoshi Imai and Toshiki Takeuchi, Parallel Computing of Interval Arithmetic in Multiple Precision for Simultaneous Linear Equations, GAKUTO International Series, Mathematical Sciences and Applications, Vol.28, 165–172, 2008, 査読有.

② Hiroshi Fujiwara, Hitoshi Imai, Toshiki Takeuchi and Yusuke Iso, Numerical treatment of analytic continuation with multiple-precision arithmetic, Hokkaido Mathematical Journal, Vol.36, 837–848, 2007, 査読有.

③ Toshiki Takeuchi, Hitoshi Imai and Yinglian Zhu, Some Numerical Experiments on Global Simulation of the Backward Heat Conduction Problem, Problem with a Variable Transform on Time, Theoretical and Applied Mechanics Japan, Vol.55, 175–184, 2006, 査読有.

〔学会発表〕（計 2 件）

① 金珍玉, 竹内敏己, 今井仁司, 坂口秀雄, 円環領域における Cauchy 問題の無限精度数値計算, 第 56 回理論応用力学講演会講演論文集, NCTAM2007, 541–542, 2007, 日本学術会議.

② 竹内敏己, 今井仁司, ラプラス作用素の Cauchy 問題の解の接続に関するいくつかの数値計算, 第 57 回理論応用力学講演会講演論文集, NCTAM2007, 515–516, 2008, 日本学術会議.

6．研究組織

(1) 研究代表者

竹内 敏己 (TAKEUCHI TOSHIKI)
徳島大学・大学院ソシオテクノサイエンス研究部・教授