様 式 C－19、F－19－1、Z－19 （共通）

科学研究費助成事業　研究成果報告書

令和 3 年 5 月 31 日現在

機関番号：34310
研究種目：基盤研究(C)（一般）
研究期間：2018～2020
課題番号：18K03436

研究課題名（和文）微分方程式の解の滑らかさの可視化による数値計算の品質保証に関する基礎研究

研究課題名（英文）Basic research on quality assurance of numerical simulations by visualizing the regularity of solutions of differential equations

研究代表者
今井　仁司（Imai, Hitoshi）

同志社大学・理工学部・教授

研究者番号：80203298

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）：1変数函数の特異点の場所とそこでの滑らかさを調べる数値手法を開発した。また、補間函数が境界付近で激しく振動すること、局所平均による平滑化によって振動が局在化すること発見した。爆発解を持つ非線型常微分方程式に対して、数値極限を用いた爆発時刻の高精度数値計算法を開発し、解の数値正則性地図を作成することに成功した。ヘルダー連続解を持つ非整数階微分方程式に対して、解の数値正則性地図を作成することに成功した。この地図から、Caputo微分が階数1の前後で性質が変わることや精度スパイク現象を発見した。被積分函数が鋭いピークをもつときの高精度数値積分法を開発し、数値計算の高速化も行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義
学術的意義は理論研究の発展や研究者人口の拡大への貢献にある。それには、本課題研究が基礎とする数値計算の汎用性、その数値計算による数学的性質の可視化が重要な役割を果たす。社会的意義は正確な数理モデル構築の貢献にある。数値計算の汎用性から、計算対象の問題や方程式は実用レベルの複雑なものが扱える。例えば本課題研究が想定した微分積分方程式は、世界最先端の近赤外光を使った癌治療法である光免疫療法に関連する。非整数階微分方程式は血糖値変化の数理モデルに現れる。本課題研究で提案した問題や解の数学的性質を数値計算で明らかにする研究は、このような実用問題に対して正確なモデルを構築する際に役立つ。

研究成果の概要（英文）：We developed numerical methods to investigate the location of singular points of one-variable functions and their smoothness at singular points. We found that the interpolated function oscillates violently near the boundary, and that the oscillation is localized by local averaging. For nonlinear ordinary differential equations with blow-up solutions, we developed highly accurate numerical methods for the blow-up time using the numerical limit, and succeeded in creating numerical regularity maps of the solution. For fractional differential equations with Helder continuous solutions, we succeeded in creating numerical regularity maps of the solution. They show that the property of the Caputo derivative changes whether the order is greater than or less than 1. We also found that the accuracy spike phenomenon occurs. We developed highly accurate numerical integration methods when the integrand has a sharp peak, and also developed methods for fast numerical computations.

研究分野：数値解析学

キーワード：品質　正則性　地図　数値計算　微分方程式　滑らかさ　可視化

※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

計算機性能の飛躍的な向上と可視化も含めた数値計算ソフトウエアの充実により、一昔前には専門家がスーパーコンピュータを利用しても困難であった複雑で大規模な数値計算が、研究室の計算環境で容易に実現できるようになった。これにより流体現象で代表される強い非線型を持つ問題や、逆問題で代表される非適切問題等の種々の微分方程式の数値計算が、幅広く行われるようになってきた。さらに画像処理技術の進歩により、計算結果の可視化は優れたソフトウエアで容易に実現され、我々は可視化された数値シミュレーションを通して最先端の科学・技術の扱う現象の神秘に驚かされることも多い。しかし、数値計算そのものに目を向けると、扱われる問題の重要性と多様化とは裏腹に、計算の精度を含めた「数値計算の品質保証」の議論が置き去りにされている。非線型性の強いあるいは非適切な微分方程式については、その数値計算の品質保証は自明ではなく、一般には様々な数値計算上の問題が生じることは周知の通りである。ブラックボックス化された「優秀な」計算環境と数値計算ソフトウエアが「ほどよく」問題を処理し、またシミュレーション結果は「もっともらしく」可視化されている。ここにおける数値計算の役割は近似解を求めることに留まっており、それ以上の価値を見出すことは難しい。これは最先端の科学・技術を支える数値計算の危機といわざるを得ず、最先端の科学・技術研究そのものの危機を意味する。

２．研究の目的

本課題研究は、微分方程式の数値計算の信頼性を新たな視点から論じようとするものであり、従前とは異なる高品質の数値計算を目指す。そのために、問題そのものや問題の解の数学的性質を高度な数値計算を用いて可視化する。可視化の利点は、数学的性質の理解が容易となって研究の方向性が明確になり、より深い研究へ移行しやすいことにある。本課題研究では、このような研究の流れを実現するための基礎・土台の確立を目指す。理論家に興味を持ってもらえる事案を吟味することから始めて、得られた成果を公開して当該分野の研究の発展に貢献する。さらに、数値計算にこだわることで、その汎用性を利用して、複雑な実用問題の解析へと研究を誘う。その際、本課題研究の成果が、複雑な実用問題の正確な数理モデル構築に役立つことを目指す。

３．研究の方法

代表者らは先行研究において、打ち切り誤差を任意に小さくできる高精度離散化手法のスペクトル法と丸め誤差を任意に小さくできる多倍長演算を併用した数値計算法によって、逆問題の直接数値計算等を可能にしてきた。このスペクトル法の高精度性は、スペクトル精度と呼ばれる数値解の収束率と厳密解の滑らかさの関係性を根拠としている(文献①、②)。本課題研究では、スペクトル法のこの関係性を本来の意味に立ち戻って利用する。スペクトル法にも様々な種類があるが、非線型問題にも適用が容易であるスペクトル選点法に注目する。このスペクトル選点法を用いて、微分方程式の解の滑らかさや解の存在区間の可視化等を行う。その際に必要とされる数値手法の開発も行う。数値計算においては、計算機に由来する丸め誤差の影響を排除するために、分担者が開発しアップデートしているコンパクトかつ高速の多倍長演算ライブラリexflib(文献③、④)を用いる。本課題研究の重要性に着目してもらえるように研究対象を吟味して、長年研究されてきた爆発解を持つ非線型常微分方程式や最近注目を集めている非整数階微分方程式を主として扱うことにする。

４．研究成果

(1)１変数函数の特異性を特定する数値手法の開発(文献⑤、⑥)

代表者は、ある双曲型方程式に対して滑らかさが変数に依存する厳密解を考案し、解の滑らかさの変数依存性の数値計算に着手したところ、解釈に困る数値計算結果(未公表)が得られて研究が停滞した。そこで、解の数値正則性地図が研究の停滞を解消する手段になるのではないかと考えて、解の滑らかさをより詳しく調べる数値手法の開発を試みることにした。基礎的な技術の確立を目指して、１変数函数の特異性を調べる数値計算方法の開発を行った。

まず、特異点(解析的でない点)が１つの１変数函数で、特異点における滑らかさが異なるものを考案した。これら１変数函数の特異点の場所とそこにおける滑らかさを調べる数値手法を開発した。開発にあたって注目したのは、不連続函数に対するFourier級数(補間函数)が不連続点付近で振動するGibbs現象である。補間函数の構成には、スペクトル選点法のなかでも最良近似に関係し周期性の仮定が不要であるChebyshevスペクトル選点法を用いた。Chebyshev多項式も三角関数を基礎としているので、Gibbs現象の特性を利用できる可能性がある。与えられた１変数函数に対して、Chebyshevスペ

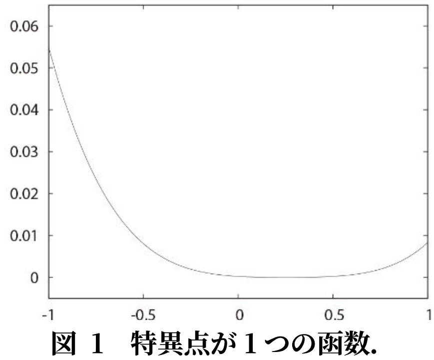

図 1　特異点が１つの函数.

クトル選点法を用いて補間函数を構成し、近似の次数が異なる 2 つの補間函数の差を誤差としてその振る舞いを数値的に調べた。近似の次数を上げていくと、誤差がゼロに収束する領域とそうでない領域が区別でき、これによって特異点の場所を高精度に数値的に特定することができた。図 1 のような滑らかに見える函数に対しても、特異点の位置の特定ができたのは驚きであった。誤差の収束率から特異点における函数の滑らかさも特定できた。

次に、より複雑な数値正則性地図のための基礎研究として、特異点(解析的でない点)が 2 つで、特異点における滑らかさが異なる 1 変数函数を調べた。滑らかさの特定には、選点上の函数値から Chebyshev スペクトル選点法の微分行列を用いて近似導函数を構成しそれを用いた。微分行列の階数に応じて近似導函数のグラフにデルタ函数的なものが見られれば、その場所が特異点の場所であり、階数からそこにおける連続微分可能階数がわかるはずである。数値計算の結果、2 つの特異点の場所とそこにおける連続微分可能階数が推定できた。一方、2 つの特異点における連続微分可能階数の小さい方の値より高次の近似導函数のグラフには激しい振動現象が見られ、特異点のみならず区間の端点でも激しい振動が起こること、近似の次数に関する平均化によって振動現象がある程度おさえられるものの振動が局在化すること(図 2)、次数平均と局所平均による平滑化によって振動現象をさらに押さえることができること、近似次数が素数であるときの次数平均は振動現象の局在化を起こしにくいこと等、興味深い知見が得られた。

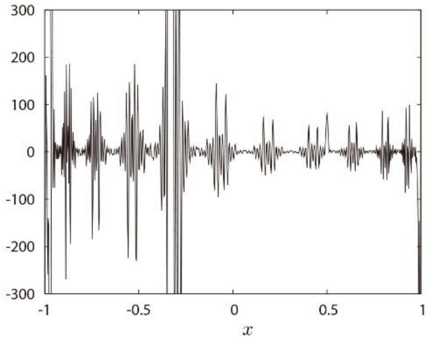

図 2　振動の局在化.

以上の数値計算において、連続微分可能階数が大きくないため、多倍長演算は不要で倍精度で十分であることもわかった。

(2)爆発解を持つ非線型常微分方程式の解の数値正則性地図の作成(文献⑦)

爆発解を持つ非線型常微分方程式の解の数値正則性地図を求める手法を確立した。数値計算は丸め誤差の影響を排除するために exflib による多倍長演算を用いた。

まず、爆発時刻の高精度推定を行うために、陽的 4 次 Runge-Kutta 法によって数値解を求めた。この計算法によって、非線型常微分方程式の数値解を漸化式の形で容易にかつ簡単にまた高精度で求めることができる。次に、得られた数値解に有界化を適用した。これによって、数値解の値が無限大であることと有界化後の値が 1 であることが対応するので、爆発時刻が回帰直線によって求められる(図 3)。これは、無限大を扱う数値計算を実行したことを意味する。これによって求められた爆発時刻は Runge-Kutta 法の時間刻み幅の函数となっているので、回帰直線を用いて時間刻み幅 0 の爆発時刻を求めることができる(図 4)。時間刻み幅 0 という状況は数学の世界の話であるので、それを数値計算で垣間見たことを興味深い。これら 2 つの回帰直線を用いた補外の計算を数値極限と呼んだ。時間の刻み幅に関する数値極限は、Runge-Kutta 法における時間刻み幅が固定されているので可能となっている。以上の手法によって爆発時刻の推定が、誤差が 10^{-5}～10^{-6} という極めて高精度で実行できた。爆発解に対する数値計算では可変時間刻み幅を採用するのが常識的となっているため、本研究は常識を覆すものとなっている。

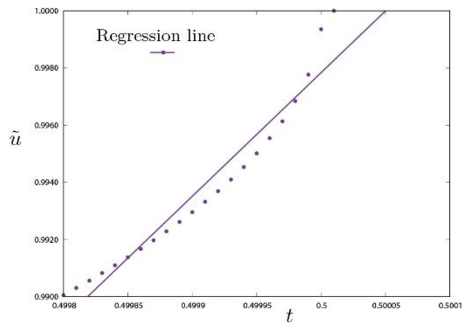

図 3　有界化による爆発時刻の計算.

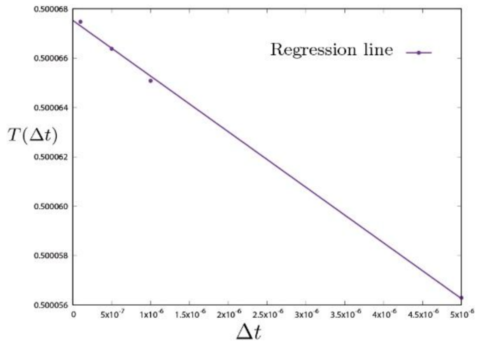

図 4　数値極限による爆発時刻の計算.

次に、初期時刻から推定された爆発時刻前後までの区間の解の滑らかさを、Chebyshev スペクトル選点法で調べた。その際、方程式が非線型であるので離散化方程式も非線型連立方程式となる。これを解くためにニュートン法を適用した。スペクトル法の特徴として、解の滑らかさと誤差の収束率が関係することが知られている。初期時刻から推定爆発時刻の直後の区間において、数値解は収束しなかった。これと爆発時刻の数値的な推定手続きを総合すると、爆発現象の存在が数値的に示されたといえる。初期時刻から推定爆発時刻の直前の区間において、数値解は指数函数的に収束した。これによって、スペクトル法の特徴から、この区間において解析的な解が存在することが数値的に示された。これらの結果を総合して、

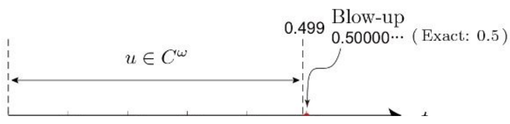

図 5　解の数値正則性地図.

解の数値正則性地図を作成することに成功した(図 5)。この数値正則性地図は、本課題研究が目指した、近似解のプロファイルを見せる役割しかなかった従前の数値計算とは異なる高品質の数値計算の典型例である。

(3)Hölder 連続解を持つ非整数階微分方程式の数値正則性地図の作成

非整数階微分方程式は、最近様々な現象の数理モデルとして注目されている。代表者らは既に、非整数階微分のなかでも初期値問題が扱いやすい Caputo 微分に対して、高精度離散化手法である Chebyshev スペクトル選点法を適用する方法を提案していた。微分方程式の数値計算において通常 Hölder 連続解を意識することはほとんどない。一方、非整数階微分方程式においては、Hölder 連続函数に対する非整数階微分の公式がよく知られている。そこで、非整数階微分方程式の Hölder 連続解に注目して数値計算を行った。数値計算は丸め誤差の影響を排除するために exflib による多倍長演算を用いた。膨大な数値実験の結果、ある規則性の存在が示唆されたため、規則性を可視化することにした。それが図 6 である。解の Hölder 指数と微分階数と誤差の収束率の関係性を示すものであり、解の数値正則性地図となっている。この地図から、数値計算における精度のスパイク現象が見られ、Caputo 微分作用素は階数が 1 未満と 1 以上では性質が異なることがわかる。この成果をしたためた論文を現在執筆中である。

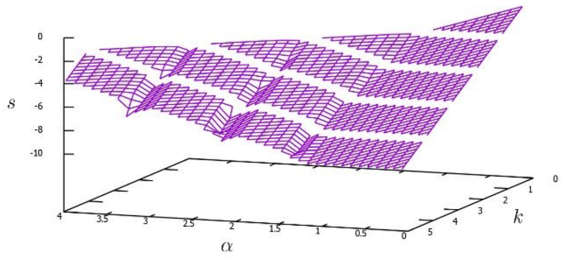

図 6　解の数値正則性地図.

(4)鋭いピークを持つ周期函数の 1 周期にわたる積分の高精度数値計算法の開発(文献⑧)

人体の内部検査は非破壊検査が基本であり、X 線 CT(X-ray computed tomography)と MRI(magnetic resonance imaging)がその有名な例であるが、X 線による被爆といった健康上の問題点や装置が高価であるという問題点がある。そこで、近年、体内の人体組織を安全かつ安価に画像化する手法として、近赤外光を用いた拡散光トモグラフィが注目されている。また、近赤外光を用いた癌治療法の光免疫療法が日本人によって開発され、そのための薬が世界で初めて日本で承認されたことはつい最近の話である。この近赤外光の伝播を記述する方程式は微分積分方程式であり(文献⑨、⑩、⑪)、その高品質数値シミュレーションには特別な注意が必要となる。というのも、方程式の解が例え穏やか（導函数の値がそれほど大きくない）であっても、積分項に積分核があるため、積分核が特異的であると被積分函数(積分核と解の積)が特異的になるためである。その様子を図 7、8 に示す。このような特異的な状況は積分項のない微分方程式では起こりえない。我々の目指す方程式の解の数値正則性地図の作成には、数値解の収束性の振る舞いの解析が必要であり、振る舞いを攪乱する数値誤差は排除しなくてはならない。そのために、微分積分方程式では、積分項の高精度数値計算が重要となる。さらに、微分積分方程式の数値解の振る舞いを調べるときにスペクトル法を用いるのであれば、積分項の高精度数値計算を考えるとき離散化法の整合性を考える必要がある。

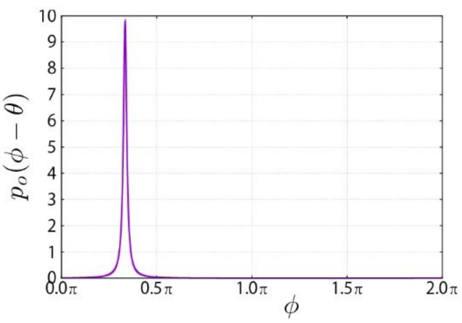

図 7　特異的な積分核.

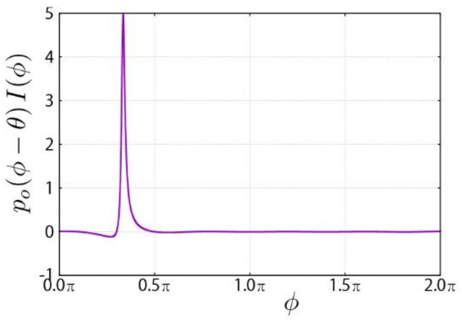

図 8　特異的な被積分函数.

我々は、PAT(peak adjustment transform)という手法を開発し、高精度性と離散化法の整合性の問題点を解決した。積分核は、従来よく用いられてきた Poisson 核に加えて新たに一般ベキ乗核を提案した。スペクトル選点法としては Fourier スペクトル選点法と Chebyshev スペクトル選点法を調べた。Fourier スペクトル選点法は、選点が等間隔に分布しているために PAT には使えない。数値実験では、PAT を適用しない Fourier スペクトル選点法と Chebyshev スペクトル選点法、PAT を適用した Chebyshev スペクトル選点法を比較した。数値計算結果の一例を図 9 に示す。図 9 の積分核は一般ベキ乗核である。PAT を適用しない Fourier スペクトル選点法と Chebyshev スペクトル選点法の精度は悲惨なものである。被積分函数が周期的であるために、もとの微分積分方程式の離

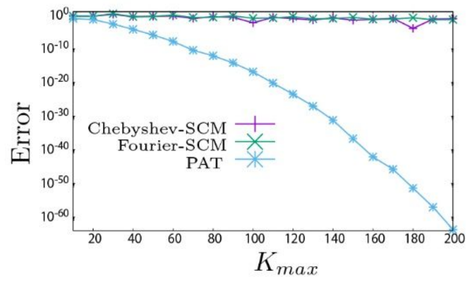

図 9　計算精度の比較.

散化を Fourier スペクトル選点法で行いがちとなるが、図 9 はその選択が危険であることを示している。また、Chebyshev スペクトル選点法でも PAT を適用しないと高精度の期待が裏切られる。このように、積分核が特異的な場合、PAT を適用しなければ積分項から大きな数値誤差が生じ、これによってもとの微分積分方程式の数値解の振る舞いが攪乱されることがわかる。もとの微分積分方程式の解の数値正則性地図を作成することは困難となる。ただし、PAT を適用すると計算規模が極めて大きくなり、極めて長大な計算時間を要する。近似の次数が 100 の場合、Fourier スペクトル選点法の計算規模を 1 とすると、Chebyshev スペクトル選点法は 100、PAT を適用した Chebyshev スペクトル選点法は 100 万になる。この非実用的な長大な計算時間対策として、データベースを利用する形に PAT の式を書き直すことによって、PAT を用いない Chebyshev スペクトル選点法と同じ計算時間で実行できる高速化に成功した。このデータベースは、事前に独立に並列計算できるため、近年のマルチコアが一般的となっている計算機環境ではさほどの負担とはならない。なお、この研究においても、丸め誤差の影響が無視できなかったため、exflib による多倍長演算を用いた。

＜引用文献＞

① C. Canuto et al.、Spectral Methods: Fundamentals in Single Domains、Springer-Verlag、Berlin、Heidelberg、2006
② C. Canuto et al.、Spectral Mthods: Evolution to Complex Geometries and Applications to Fluid Dynamics、Springer-Verlag、New York、2007
③ H. Fujiwara、Y. Iso、Design of a multiple-precision arithmetic package for a 64-bit computing environment and its application to numerical computation of ill-posed problems、IPSJ J.、Vol.44、2003、925−931
④ H. Fujiwara、Design and Implementation of Multiple-Precision Arithmetic Environment in MATLAB for Reliable Numerical Computations、Jpn. J. Ind. Appl. Math.、Vol. 36、2019、1089−1100
⑤ 今井仁司、坂口秀雄、スペクトル選点法による 1 変数関数の特異性に関する基礎的な数値実験、同志社大学ハリス理化学研究報告、Vol. 59、2019、217−226
⑥ 今井仁司、坂口秀雄、チェビシェフ選点法の微分行列を用いた 1 変数関数の正則性に関する数値実験、同志社大学ハリス理化学研究報告、Vol. 62、2021(採録決定)
⑦ H. Soutome、H. Imai、 Numerical Regularity Map for Blow-Up Solutions of Nonlinear Ordinary Differential Equations、Adv. Math. Sci. Appl.、Vol. 29、2020、393−402
⑧ H. Ito、H. Imai、T. Ooura、Development of a High-Precision Numerical Method for Integration over One Period of Periodic Functions with a Sharp Peak、Adv. Math. Sci. Appl.、Vol. 30、2021、175−189
⑨ H. Fujiwara、K. Sadiq、A. Tamasan、A Fourier Approach to the Inverse Source Problem in an Absorbing and Anisotropic Scattering Medium、Inverse Problems、Vol. 36、2019、015005
⑩ H. Fujiwara、A. Tamasan、Numerical Realization of a New Generation Tomography Algorithm Based on the Cauchy-type Integral Formula、Adv. Math. Sci. Appl.、Vol. 28、2019、413−424
⑪ H. Fujiwara、K. Sadiq、A. Tamasan、Numerical reconstruction of radiative sources in an absorbing and non-diffusing scattering medium in two dimensions、SIAM J. Imaging Sci.、Vol.13、2020、535−555

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕　計6件（うち査読付論文　6件／うち国際共著　3件／うちオープンアクセス　2件）

１．著者名 Hiroko Soutome, Hitoshi Imai	４．巻 29
２．論文標題 Numerical Regularity Map for Blow-Up Solutions of Nonlinear Ordinary Differential Equations	５．発行年 2020年
３．雑誌名 Adv. Math. Sci. Appl.	６．最初と最後の頁 393 - 402
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	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 Hirokazu Ito, Hitoshi Imai, Takuya Ooura	４．巻 30
２．論文標題 Development of a High-Precision Numerical Method for Integration over One Period of Periodic Functions with a Sharp Peak	５．発行年 2021年
３．雑誌名 Adv. Math. Sci. Appl.	６．最初と最後の頁 175 - 189
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	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 Fujiwara Hiroshi、Sadiq Kamran、Tamasan Alexandru	４．巻 13
２．論文標題 Numerical Reconstruction of Radiative Sources in an Absorbing and Nondiffusing Scattering Medium in Two Dimensions	５．発行年 2020年
３．雑誌名 SIAM Journal on Imaging Sciences	６．最初と最後の頁 535～555
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1137/19M1282921	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 該当する

１．著者名 Hiroshi Fujiwara, Alexandru Tamasan	４．巻 28
２．論文標題 Numerical realization of a new generation tomography algorithm based on the Cauchy-type integral formula	５．発行年 2019年
３．雑誌名 Adv. Math. Sci. Appl.	６．最初と最後の頁 413-424
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	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 該当する

１．著者名 Fujiwara Hiroshi、Sadiq Kamran、Tamasan Alexandru	４．巻 36
２．論文標題 A Fourier approach to the inverse source problem in an absorbing and anisotropic scattering medium	５．発行年 2019年
３．雑誌名 Inverse Problems	６．最初と最後の頁 015005～015005
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1088/1361-6420/ab4d98	査読の有無 有
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 該当する

１．著者名 今井仁司，坂口秀雄	４．巻 59(4)
２．論文標題 スペクトル選点法による1変数関数の特異性に関する基礎的な数値実験	５．発行年 2019年
３．雑誌名 同志社大学ハリス理化学研究報告	６．最初と最後の頁 217-226
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
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3件（うち招待講演　0件／うち国際学会　0件）

１．発表者名 加藤真菜、藤原宏志、今井仁司
２．発表標題 1次元非整数階微分方程式のCauchy問題のヘルダー連続解に対する数値解析
３．学会等名 北陸応用数理研究会2021
４．発表年 2021年

１．発表者名 伊藤寛和、今井仁司
２．発表標題 鋭いピークを有する周期関数の1周期にわたる積分に対する高精度数値計算法の開発
３．学会等名 北陸応用数理研究会2021
４．発表年 2021年

1．発表者名 加藤 真菜、藤原 宏志、東森 信就、 今井 仁司
2．発表標題 分数階微分方程式のヘルダー連続解に対する数値実験
3．学会等名 第65回理論応用力学講演会・第22回土木学会応用力学シンポジウム
4．発表年 2019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
研究分担者	藤原 宏志 (Fujiwara Hiroshi) (00362583)	京都大学・情報学研究科・准教授 (14301)	
研究分担者	磯 祐介 (Iso Yuusuke) (70203065)	京都大学・情報学研究科・教授 (14301)	

	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
連携研究者	五月女 仁子 (Soutome Hiroko) (80440262)	帝京大学・経済学部・経営学科 (32643)	

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