

令和 5 年 6 月 12 日現在

機関番号：32689

研究種目：若手研究

研究期間：2019～2022

課題番号：19K14601

研究課題名（和文）精度保証付き数値計算による反応拡散モデルの解に対する符号変化構造解析

研究課題名（英文）Sign-change structure analysis for reaction-diffusion models based on rigorous numerical computation

研究代表者

田中 一成（Tanaka, Kazuaki）

早稲田大学・理工学術院総合研究所・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） 2,900,000円

研究成果の概要（和文）：本研究の目的は精度保証付き数値計算を用いて反応拡散モデルの符号変化構造解析を行い、数学的視点から現象解明に貢献することであった。

研究代表者はモデルを記述する作用素の固有値に関する情報と精度保証結果（解の包含情報）から真解の正値性を事後保証する手法を確立した。この手法をアレン・カーン方程式（水の状態変化や相分離現象を記述する反応拡散モデル）に応用し、液相個層の共存関係の証明を与えることに成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

反応拡散モデルを含む微分方程式の解に対する精度保証付き数値計算の従来研究は「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、研究代表者はそこに「符号の保証」という新たな価値を与えた。この着眼点が評価され、精度保証という研究分野が発足した当初から40年以上の歴史を持ち、現在も最も権威があるとされる国際学会SCANの基調講演者として招待された。

研究成果の概要（英文）：The aim of this research was to conduct a sign-change structure analysis of reaction-diffusion models using guaranteed-accuracy numerical computation, thereby contributing to elucidating phenomena from a mathematical perspective. The PI established a method to post-validate the positivity of the true solution using the information on the eigenvalues of the operators describing the model and the results of guaranteed accuracy (inclusion information of solutions). This method was applied to the Allen-Cahn equation (a reaction-diffusion model that describes water state changes and phase separation phenomena) and successfully provided proof of the coexistence relationship of the liquid phase layers.

研究分野：数値解析

キーワード：精度保証付き数値計算 計算機援用証明 符号変化構造解析

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

(1) 精度保証付き数値計算とは

精度保証付き数値計算は対象とする問題の近似解を求め、その近くに真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、真解を包み込む上界 $\hat{u} + r$ 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のことである(右の図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厳密な結果を得ることから、当初から世界的に注目されていた。

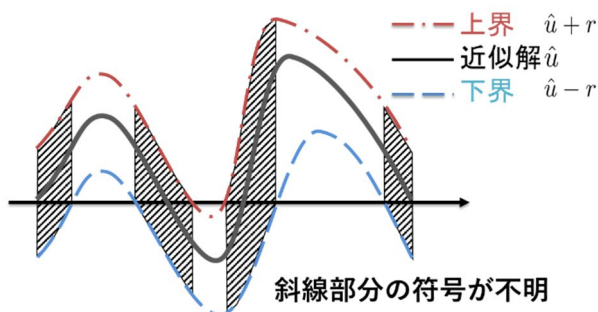


図1: 精度保証の概念図。上界と下界の符号が異なる斜線部分では真解を含む区間が0を跨ぐため、真解の符号が不明である。

(2) 従来の問題点

当初から、研究代表者は以下の反応拡散モデル(1)を対象として精度保証付き数値計算の研究を遂行していた。本モデルは化学、物理学、生物学、地質学、生態学などの分野に登場する現象を表現する支配方程式であり、それらの数値シミュレーションのために不可欠のものである。

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

本方程式は物理モデルの性質上、その符号変化に関する情報が重要となることが多い。一例を挙げれば、非線形項が $f(u) = \varepsilon^{-2}(u - u^3)$ (ε は特異摂動という現象に関係する非常に小さな正値パラメータ)で表される方程式は、アレン・カーン方程式と呼ばれる水の状態変化や合金の生成過程等を表す重要な方程式であり、申請者の興味の対象の1つである。本方程式は物質の濃度比を $[-1, 1]$ に正規化した物理モデルに相当し、どこで解 u の符号が変化しているのかという情報が現象解明の上で重要となる。図2にその近似解例を示す。しかし、本方程式に限らず一般に近似解 \hat{u} と存在証明された真解 u の符号変化構造は一致しない。

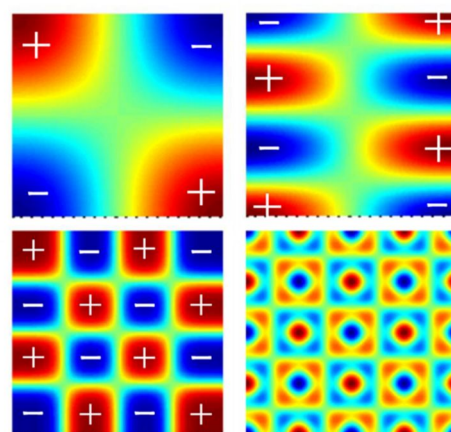


図2: アレン・カーン方程式の近似解。正負のレイヤーで物質の濃度比(どちらの物質濃度が高いのか)を表している。

図1は1次元領域における精度保証付き数値計算の概念図を表している。図1の斜線部分に表されるように上界と下界の符号が異なる領域、即ち $(\hat{u} + r)(\hat{u} - r) < 0$ なる領域では、真解 u の存在が示された区間が0を含むため、 u の符号変化構造が不明である。すなわち、誤差半径が0でない限り、真解 u が斜線部分で振動しその符号が何度か変化する可能性を否定できない。このように、単に近似解と誤差半径を求めるだけでは、存在証明された真解の符号変化構造は分からないというのが当初の現状であった。例えば図2の左上は4つのNodal Setsを持つ解のよう

に見えるが、実際は図 1 で示したように近似解と誤差上限の情報のみからではその数は特定できない。

2. 研究の目的

本研究の目的は、真解 u が近似解 \hat{u} の付近に存在することを具体的な誤差上限 r と共に保証し、更に u の符号変化構造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。特に“符号変化構造”とは以下の2つを意味する。

(Nodal sets の数) u の正負それぞれの連結な同符号領域(Nodal sets)がいくつあるか
(Nodal line の位相構造) $u=0$ となる点を結んだ線(Nodal line)がどのように交わるか

すなわち、(1)の真解 u が数値近似解 \hat{u} の付近に存在することを具体的な誤差上限 r と共に保証し、更に u の符号変化構造をも数学的に厳密な意味で保証をするということが本研究の目的である。

3. 研究の方法

本研究では、以下の3つの手順で(1)の真解 u の存在性および符号変化構造を明らかにした。

手順1: (1)の近似解 \hat{u} を求め、その近傍に真解 u が存在することを示す

手順2: 符号変化構造が不明な領域 U を特定し、 U 内のNodal sets非存在性を証明する

手順3: 手順2で得た情報を元にNodal setsの数とNodal lineの位相構造を決定する

特に手順2,3においてはモデルを記述する作用素の固有値に関する情報と図1のような精度保証結果から真解の符号変化構造を決定する手法の確立を試みた。

4. 研究成果

(1) 主結果

研究代表者は「レベルセット内における局所ディリクレ問題に着目する手法」を考案し、その領域 U の中における、作用素の固有値(線形および非線形固有値問題)に関する情報と図1のような精度保証結果から真解の符号変化構造を決定する手法を確立した。この手法をアレックス・カーン方程式(水の状態変化や相分離現象を記述する反応拡散モデル)に応用し、図2のように液相個層の共存関係の証明を与えることに成功した。

従来は「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、研究代表者はそこに「符号の保証」という新たな価値を与えた。この着眼点が評価され、精度保証という研究分野が発足した当初から40年以上の歴史を持ち、現在も最も権威があるとされる国際学会SCANの基調講演者として招待されている(2021年9月発表)。これをきっかけに、研究代表者は同分野の新国際ワークショップを主催するに至った。

(2) 当初予期していなかった知見

さらに、手順2の中で核となったアイデアである「レベルセット内における局所ディリクレ問題に着目する手法」は定常問題に対する解のレギュラリティの理論解析や数値解析における良いオーダーの L^1 誤差評価に繋がる可能性があることが明らかになった。これは当初予定していなかった成果である。今後は本結果を追求することで弱解の H^1 誤差評価から直接的に L^1 誤差評価を得る新しい理論に繋がる可能性がある。当該 L^1 誤差評価は本研究の主目的である符号変化構造解析に直接応用可能であるため、それを本研究の主目的である符号変化構造解析に還元し、より精密な誤差評価と対象問題の符号変化構造のより深い説明が実現されることが期待される。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 6件）

1. 著者名 Tanaka Kazuaki, Plum Michael, Sekine Kouta, Kashiwagi Masahide, Oishi Shin'ichi	4. 巻 43
2. 論文標題 Rigorous Numerical Enclosures for Positive Solutions of Lane-Emden's Equation with Sub-Square Exponents	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Numerical Functional Analysis and Optimization	6. 最初と最後の頁 322 ~ 349
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/01630563.2022.2029485	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 Tanaka Kazuaki, Asai Taisei	4. 巻 3
2. 論文標題 A posteriori verification of the positivity of solutions to elliptic boundary value problems	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Partial Differential Equations and Applications	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/s42985-021-00143-2	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 -
1. 著者名 Sekine Kouta, Tanaka Kazuaki, Oishi Shin'ichi	4. 巻 106
2. 論文標題 Inverse norm estimation of perturbed Laplace operators and corresponding eigenvalue problems	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Computers & Mathematics with Applications	6. 最初と最後の頁 18 ~ 26
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.camwa.2021.12.002	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 -
1. 著者名 Asai Taisei, Tanaka Kazuaki, Oishi Shin'ichi	4. 巻 399
2. 論文標題 Numerical verification for asymmetric solutions of the Helmholtz equation on bounded domains	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Computational and Applied Mathematics	6. 最初と最後の頁 113708 ~ 113708
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cam.2021.113708	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 -

1. 著者名 Tanaka Kazuaki	4. 巻 -
2. 論文標題 A posteriori verification for the sign-change structure of solutions of elliptic partial differential equations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics	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/s13160-021-00456-0	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 -

1. 著者名 Matsushima Yuta, Tanaka Kazuaki, Oishi Shin'ichi	4. 巻 7
2. 論文標題 Numerical verification for positive solutions of Allen-Cahn equation using sub- and super-solution method	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Advanced Simulation in Science and Engineering	6. 最初と最後の頁 136 ~ 150
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.15748/jasse.7.136	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 -

1. 著者名 Tanaka Kazuaki	4. 巻 370
2. 論文標題 Numerical verification method for positive solutions of elliptic problems	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Computational and Applied Mathematics	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) 10.1016/j.cam.2019.112647	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 -

〔学会発表〕 計20件 (うち招待講演 7件 / うち国際学会 5件)

1. 発表者名 田中一成
2. 発表標題 楕円型偏微分方程式の解符号検証法といくつかの課題
3. 学会等名 科学計算・計測工学連携ワークショップ (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 田中一成
2. 発表標題 微分方程式に対する精度保証付き数値計算法とニューラルネットワークによる解の包含
3. 学会等名 RIMS共同研究(公開型)数値解析が拓く次世代情報社会~エッジから富岳まで~(招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 多田秀介, 浅井大晴, 田中一成, 大石進一
2. 発表標題 Batt-Faltenbacher-Horst方程式の解の精度保証付き数値計算
3. 学会等名 日本応用数理学会2022年度年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kazuaki Tanaka
2. 発表標題 Verification of sign-change structure for elliptic partial differential equations
3. 学会等名 The 19th International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic, and Verified Numerical Computations (SCAN 2020) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Taisei Asai, Kazuaki Tanaka, Shin'ichi Oishi
2. 発表標題 Numerical verification for positive solutions of the Henon equation on some bounded domain
3. 学会等名 The 40th JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST 2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田中一成
2. 発表標題 楕円型偏微分方程式の解の包含から分かること
3. 学会等名 第3回 数学と諸分野の連携に向けた若手数学者交流会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 田中一成
2. 発表標題 常微分方程式に対する計算機援用解析
3. 学会等名 RIMS共同研究（公開型）「常微分方程式の定性的理論とその応用」（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田中一成
2. 発表標題 エノン方程式の解に対する正值性検証法
3. 学会等名 精度保証付き数値計算の実問題への応用研究集会（NVR 2020）（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 浅井大晴，田中一成，大石進一
2. 発表標題 精度保証付き数値計算を用いたHenon方程式の対称性に関する考察
3. 学会等名 精度保証付き数値計算の実問題への応用研究集会（NVR 2020）（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 田中一成, 浅井大晴
2. 発表標題 楕円型境界値問題に対する解符号の事後検証法
3. 学会等名 日本応用数理学会2020年度年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 浅井大晴, 田中一成, 大石進一
2. 発表標題 精度保証付き数値計算を用いたHenon方程式の多重解の存在証明
3. 学会等名 日本応用数理学会2020年度年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yuta Matsushima, Kazuaki Tanaka, and Shin'ichi Oishi
2. 発表標題 Numerical verification for positive global-in-time solutions of Allen-Cahn equation in three space dimensions using sub- and super-solution method
3. 学会等名 The 38th JSST Annual International Conference on Simulation Technology (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Taisei Asai, Kazuaki Tanaka, and Shin'ichi Oishi
2. 発表標題 Numerical verification for asymmetric solutions of the Henon equation
3. 学会等名 The 38th JSST Annual International Conference on Simulation Technology (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kazuaki Tanaka, Kouta Sekine
2. 発表標題 Rigorous solution-enclosures of elliptic problems and its application to the best embedding constants, Minisymposium "Numerical verification methods and their application to differential equations"
3. 学会等名 9th International Congress on Industrial and Applied Mathematics - ICIAM 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 田中一成, 中尾充宏
2. 発表標題 A priori error estimates for Poisson's equation with discontinuous coefficients
3. 学会等名 日本応用数理学会2019年度連合発表会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 松嶋佑汰, 田中一成, 大石進一
2. 発表標題 優解劣解法を用いた Allen-Cahn 方程式の正值解に対する精度保証付き数値計算
3. 学会等名 2019年度応用数学合同研究集会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 浅井大晴, 田中一成, 大石進一
2. 発表標題 精度保証付き数値計算を用いた Henon 方程式の非対称解の存在証明
3. 学会等名 2019年度応用数学合同研究集会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 田中一成
2. 発表標題 楕円型方程式の弱解に対する正值性証明法
3. 学会等名 日本応用数学会2019年度年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松嶋佑汰, 田中一成, 大石進一
2. 発表標題 空間3次元Allen-Cahn方程式の正值時間大域解に対する精度保証付き数値計算法
3. 学会等名 日本応用数学会2019年度年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 浅井大晴, 田中一成, 大石進一
2. 発表標題 Henon方程式の非対称解に対する精度保証付き数値計算
3. 学会等名 日本応用数学会2019年度年会
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
---------------------------	-----------------------	----

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
---------	---------