様式 C-19

科学研究費補助金研究成果報告書

平成２５年３月１日現在

機関番号：12612
研究種目：基盤研究（C）
研究期間：平成２１年度～平成２３年度
課題番号：21540115
研究課題名（和文）
発展方程式に対する精度保証付き数値計算ライブラリの構築
研究課題名（英文）
Validate Computation Library on Time Evolution Equations
研究代表者
山本野人（ YAMAMOTO NOBITO ）
電気通信大学・大学院情報理工学研究科・教授
研究者番号：30210545

研究成果の概要（和文）：
本課題では、発展方程式の精度保証法の基礎としての精度保証技術のライブラリ化、および､空間方向離散化後に現れる常微分方程式の取り扱いに関する新しい手法の開発を行い、それぞれについて学術論文を伴う成果を得る事が出来た。

研究成果の概要（英文）：We have investigated in computer program library including validated computation techniques which give the basis of validated computation of time evolution equations, and derived a number of new approaches to numerical verification of ODEs which appear as semi-discretized equations of PDEs. The results were published in academic journals.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合　計
2009 年度	1,300,000	390,000	1,690,000
2010 年度	1,200,000	360,000	1,560,000
2011 年度	1,000,000	300,000	1,300,000
年度			
年度			
総　計	3,500,000	1,050,000	4,550,000

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：精度保証・発展方程式・多倍長演算・プログラム自動生成・常微分方程式

１．研究開始当初の背景

精度保証付き数値計算法は 1990 年代に入って急速に進展した数値解析学の分野である。偏微分方程式の精度保証法としては、報告者もその一員である九州大学・中尾教授のグループが開発した「中尾理論」の発展があり、世界的にも見てもこのグループが常にトップの水準を保っている。

研究開始当初の状況は、楕円型境界値問題に関する「中尾理論」の適用がほぼ収束し、つぎのターゲットとして時間発展問題の精度保証が挙げられていた。各研究者は、この目標に向かってのアプローチを模索している段階であった。特に、中尾教授およびその共同研究者らは、時間発展方程式を半離散化し、得られた常微分方程式の線形化作用素のノルム評価を通じてもとの方程式の精度保証を行う方法を提案しつつあった。

山本は、時間発展方程式を半離散化して得られる常微分方程式の精度保証法について、中尾理論との整合性も見据えながら準備を進めていた。

２．研究の目的

時間発展問題の精度保証に関しては、半離

散化後の常微分方程式の扱いが鍵となる。そこで、この扱いに関係する精度保証技術を整理し、さまざまな状況に対応して研究を進めることを可能とするツールを計算機プログラムのライブラリの形で保持し、あわせて新しい精度保証技術の開発をおこなうことを目的としていた。

３．研究の方法

ライブラリに関しては、

◎　精度保証付き多倍長演算ライブラリ

◎　常微分方程式の精度保証法について、その計算機プログラムに対する自動生成ライブラリ

のふたつについて研究開発を行った。

前者は既存のものの延長線上ではなく、あたらしいコンセプトを導入して高速化・効率化を図った。後者についても、自動微分の技法に頼らず、数式処理を援用する方法を採用して開発にあたった。

新しい精度保証技術としては、力学系の知識を利用する研究方法を採った。これによって、時間無限大に至るまでの解の精度保証を行う技法や、周期解の精度保証法の開発を行った。

４．研究成果

（１）精度保証付き多倍長演算ライブラリの開発：

既存のライブラリとしては、MPFR に基づく区間演算ライブラリ MPFI などが挙げられる。これらは上限・下限の値をそれぞれ多倍長浮動小数点数で保持する方法を取っている。これに対し、我々は、中心・半径形式で区間を表現する方法を採用した。中心を多倍長浮動小数点で持ち、半径を短い仮数部の表現であらわすことで、メモリーの節約・演算の高速化を実現することができた。

演算過程における区間半径の増大の抑制に関しては、慎重な取り扱いが必要であった。倍精度の場合と異なり、多倍長独特の状況が関係して、演算速度とのあいだのオフセットを見積もることが簡単ではない。演算過程の局面ごとに多倍長演算の仮数部の長さを変化させる、部分的に倍精度演算を用いるなどの工夫を行うことで、演算速度を保ちながら区間半径の増大を抑制する手法を開発した。

結果として、四則演算および平方根の多倍長演算については、これを精度保証された任意の精度で行うライブラリを開発し、コレクト・ラウンディングに準ずる丸めを実現している。

以上については、学術雑誌に投稿し、掲載されている（雑誌論文(3)）。

（２）常微分方程式の精度保証法の計算機プログラムについて：

常微分方程式の精度保証法としては、Lohner 法が最もひろく用いられている。これに対し、研究開始の時点では Taylor Method と呼ばれる高精度計算法が開発され注目を浴びていた。雑誌論文(4)では、Taylor model の中尾理論への適用を試み、時間発展方程式への応用の足がかりとした。

また、Lohner 法については、与えられた常微分方程式に対してその計算機プログラムを自動的に実装するためのライブラリを開発した。既存の手法では自動微分を用いる方法がある。このうち、Lohner 自身が実装した AWA に関しては、実装されてからのメインテナンスが継続されず、研究開始時点ですでに使いにくいものとなっていた。そこで本研究では、MATLAB 上の数式処理ソフト Symbolic Math Tool Box と、MATLAB で動作する精度保証付き区間演算ソフト Intlab とを組み合せることで、Lohner 法のプログラム実装を自動的に行う方法を編み出した。

この方法での問題点は、数式への区間値代入の際の速度が遅い事・数式処理によって得られる式表現が長大になる事であった。これらの問題点に対しては、

◎　数式処理によって得られる表現に直接代入して計算することを避け、いったん外部ファイルに出力してこれを関数ライブラリとして用いる

◎　数式処理表現の各項を関数として保持し、これらを組み合わせた表現に変換する

などの工夫によって解決した。

その結果、Lohner 法のみならず、そこで用いられる様々な精度保証技術（例えば、Taylor 展開法や平均値形式など）についても与えられた問題に即した使い易いモジュールを生成し、初期値問題・境界値問題・随伴する変分方程式などに対する精度保証も行い得るプログラムライブラリを出力することが可能となった。

以上の結果については、雑誌論文は執筆されていないが、研究期間終了後に学会発表を行い、また報告者が指導する修士課程の学生が修士論文としてこれらの内容をまとめている。

また、自動生成ライブラリ自体は、電気通信大学のプログラムデポジットに登録する予定である。

（３）時間無限大に至るまでの解の精度保証：

時間発展方程式として特に進行波解を扱う場合には、時間無限大までの精度保証を行う必要がある。既存の方法では困難であるため、まずは常微分方程式の解に対して、時間無限大までの精度保証を行うあらたな手法を開発した。

常微分方程式の解が時間無限大で有界にとどまる場合には、位相空間上の不動点に収

束することになる。ここでは、不動点の存在と位置が確定していることを前提として、解の積分がどの程度まで不動点に近づけば吸引されるか、を精度保証法で検証する方法を採った。

位相空間中の不動点の安定性解析は、その点でのヤコビ行列の固有値解析によって行われる。したがって、不動点が知られている場合には、それが漸近安定であるかどうかを調べる事は比較的容易である。しかしながら、その吸引域に含まれる集合を同定することは、それほど容易くはない。しばしば、不変集合を同定すれば十分であると誤解されることがあるが、問題となる不動点の周辺に別のアトラクタが存在する可能性を排除できないので、不変集合の同定のみでは不十分であることがわかる。

学術雑誌掲載論文(1)では、報告者らが提示した関数方程式の解の局所一意性に関する定理を用い、不動点の特定された近傍において縮小写像定理が成立することを確認するための条件を与えた。これを精度保証付き計算で実際に検証することで、不動点の吸引域を確定し、与えられた初期値問題の解がこの吸引域に達する事を Lohner 法を用いた精度保証法によって示した。これにより、所定の初期値問題の解は、時間無限大で不動点に収束することが証明される。

その後、力学系の研究者との共同により、報告者らの局所一意性定理を用いるよりも簡便な方法として、リャプノフ関数を精度保証法で陽に校正する手法が開発された。この方法では、まずは、リャプノフ関数を不動点で０となる二次形式の形に限定し、不動点でのヤコビ行列の固有値・固有ベクトルからその形を決める。次に、これがリャップノフ関数として定義されるための条件を導出し、この条件が成立する領域を精度保証付き計算で検証する。得られた領域が不動点の吸引域に含まれる集合となる。

この手法は、漸近安定な不動点だけでなく、一般の双曲型不動点に拡張され得るもので、その後の力学系に対する精度保証を用いた解析手法にインパクトを与えた。

以上の結果は、報告者が指導する修士課程の学生の修士論文にまとめられ、また研究期間終了後の学会で発表されている(2012 年度応用数学合同研究集会など)。

（４）周期解の精度保証：

常微分方程式の周期解の存在を精度保証法で証明する方法は、実は古くから存在する。1970 年代に発表されたローレンツ方程式の周期解に対する Sinai および Vull の結果が著名である。近年では Zgliczynski の方法がある。これらはいずれもポアンカレ写像を構成して、その不動点の存在を証明するという手順を取っている。これらの方法の難点は、ポアンカレ写像を構成するためには、ポアンカレセクションから出発した解がふたたびそのセクションに戻って来るまでの時間（ファーストリターンタイム）の同定もしくは包み込みにかなりの計算コストがかかることであった。

報告者らは、ポアンカレ写像を陽に構成する事を避け、ファーストリターンタイム自体を未知数として含む方程式系を導入した。さらに、解軌道の積分とポアンカレセクションへの正射影とを組み合わせた写像を構成し、これに対する精度保証付きニュートン法を適用することで、周期解の存在に関する検証条件を導いた。

提案した手法は、

◎　ファーストリターンタイムを陽に算定する必要がないこと

◎　ファーストリターンタイムに対してニュートン法に基づく包み込みを行う事になるので、従来の方法に比べて収束が格段に速くなっていること

◎　研究成果（２）で述べた常微分方程式に対する精度保証プログラムの自動生成ライブラリのなかに本手法を組み込む事が可能であり、これを用いれば非常に簡便に周期解軌道の存在検証が行い得ること

などの多くの利点を持つ。

以上の結果を学術論文として執筆・投稿し、学術雑誌に掲載された（雑誌論文(2))。

その後、周期解軌道自体が漸近安定である場合に着目し、周期軌道に吸引される解の存在領域を検証するための精度保証法の開発に着手した。これは、研究期間内にまとめることはできなかったが、その後の進展により成果を得て、学会などでの発表を行っている（2012 年度日本数学会秋季総合分科会など)。

なお、現在ではこれらの研究成果を踏まえて力学系の精度保証法に関する研究を進展させ、この分野において注目される研究成果に結実させつつある。

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　６件）

(1) M. Harikae, N. Yamamoto, Validated Computation of Global Solutions to ODEs, Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE, Vol.4, No.1(2013), 88-96, http://dx.doi.org/10.1587/nolta.4.88

(2) 樋脇知広・山本野人 「力学系における閉軌道の存在領域の精度保証法による同定」日本応用数理学会論文誌, Vol.22, No.4 (2012), 269-276

(3) N. Matsuda, N. Yamamoto, On the basic

operations of interval multiple-precision arithmetic with center-radius form, Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE, Vol.2, No.1 (2011) 54-67, http://dx.doi.org/10.1587/nolta.2.54
(4) N.Yamamoto, T.Komori, An Application of Taylor Models to the Nakao Method on ODEs, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 26, No.1 (2009) 365-392.

〔学会発表〕(計　5件)

(1) N. Yamamoto, M. Harikae, Validated Computation of Global Solutions to ODEs, the Japan-German Workshop on Computer-Assisted proofs and Verification Methods, Karisruhe,Germany, September 18-22, 2011
(2) N. Yamamoto, N. Matsuda, Interval Multiple-Precision Arithmetic with center-radius form, SCAN2010, 14th GAMM-IMACS, International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic and Validated Numerics, ENS de Lyon, Francs, September 27-30, 2010

〔図書〕(計　1 件)

山本野人「精度保証の手法」、現代数理科学事典第 2 版 IX 章 第 6 節，丸善，2009

６．研究組織

(1)研究代表者
山本野人（　YAMAMOTO NOBITO　）
電気通信大学・大学院情報理工学研究科・教授
研究者番号：30210545

(2)研究分担者
中村健一（NAKAMURA KEN-ICHI）
金沢大学・理工研究域数物科学系・准教授
研究者番号：40293120

緒方秀教(OGATA HIDENORI)
電気通信大学・大学院情報理工学研究科・准教授
研究者番号：50242037