

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 5 月 31 日現在

機関番号：25403

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2012～2016

課題番号：24760060

研究課題名(和文)特異性をもつ方程式に対する超高性能数値解法の開発と理論動作保証

研究課題名(英文)Development of super high-efficient methods for equations with singularity and their theoretical supports

研究代表者

岡山 友昭 (Okayama, Tomoaki)

広島市立大学・情報科学研究科・講師

研究者番号：80587866

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,500,000円

研究成果の概要(和文)：特異性をもつ関数を含む微分方程式や積分方程式は、物理・化学などでしばしば現れるが、特異性のために数値シミュレーションが難しく、既存の汎用手法ではうまく扱えない。仮に既存手法を適用したとしても、従来通りの性能が出なかったり、そもそも解に収束する保証がなかったりした。そこで本研究では、特異性に強いSinc数値計算法をベースとした研究を行い、非常に高い性能をもつ数値解法を開発し、さらに理論的に動作保証も行った。

研究成果の概要(英文)：Differential equations and integral equations with singularities often arise in physics and chemistry, but numerical simulation of those equations is difficult by means of existing general numerical methods. For such equations, existing methods cannot achieve their usual performance, and there is no theoretical support of convergence to the solution. This study developed a highly efficient numerical method based on the Sinc numerical methods, which are robust and efficient for singularities. This study also gave theoretical support of the proposed method.

研究分野：数値解析

キーワード：数値解析

1. 研究開始当初の背景

自然科学・工学において現れる問題は陽に解を求めることは困難であることが多く、コンピュータを用いて近似計算・シミュレーションを行うのが通常であり、そのために様々な汎用技術が開発されている。特に有名なものが Spline 補間という方法であり、Matlab や Scilab など著名なソフトウェアにもルーチンが実装されている。

ただし、物理・化学などで現れる問題では、鋭いピークのような特異性をもつことがあり、この場合汎用技術ではうまく対応できない。例えば Abel 積分や Riemann-Liouville の非整数階積分などと呼ばれる、

$$\frac{1}{\Gamma(a)} \int_0^x \frac{f(t)}{(x-t)^{1-a}} dt \quad (1)$$

が含まれた積分方程式や、式(1)を x で微分した形(非整数階微分)が含まれた微分方程式は、熱伝導、拡散過程、粘弾性、超流動、浸透膜など、物理や化学の様々な問題に現れるところが被積分関数の分母からわかるように、これは積分区間の端点 $t = x$ で被積分関数が発散するという特異性をもち、またそれに起因して、実は方程式の解も一般に計算区間の端点で微分不可能な特異性をもつという困難がある。

ところが、扱う関数は端点では特異性があるものの、区間の内部では性質の良い「解析関数」になることが多く、その場合には Sinc 数値計算法(略して Sinc 法)と呼ばれる関数近似技法が非常に有効である。実際研究代表者は、式(1)(非整数階積分)や、式(1)を微分した形(非整数階微分)に対し、数式展開により Sinc 法を適用できる形に持ち込むことで、これまでになく速く誤差が減少する近似法の開発に成功した。これは特異性をもつ方程式に対する数値解法を開発する際のベースとして有望な手法と言える。

一方、特異性をもたない性質のよい微分方程式や積分方程式に対しては、既に Sinc 法に基づく数値解法が提案されている。ただしそれらの既存研究では、大きく分けて(I)実用的には数値解法を実装することが困難、(II)実行可能性や解の収束性が不明、という2つの問題点があった。(I)の理由は、実装にあたり方程式の解の性質を必要とする(が通常は解は未知関数である)ことである。(II)の理由は、解くべき連立1次方程式の可解性が不明であることである。既存研究の中には、(I)のために方程式の解が既知であることを前提にしたり、(II)のために計算区間が十分に小さいことを仮定したりするものもあるが、これらは現実的な仮定とは言えないことに注意すべきである。そのため、いまだ実用的とは言いがたい状況であった。

それに対し、研究代表者はこの分野に作用素論の視点を持ち込むことで、上記の難点(I)と(II)が現実的な仮定の下で解決されることを数々の方程式に対して示した。具体的には

それぞれ、実装に必要な情報は既知の関数から得られること、また連立1次方程式はサンプル数 N を大きくすれば必ず一意可解になることを示した。これらの理論動作保証により、実用化に大きく近づけたと言える。

2. 研究の目的

本研究の目的は、特異性がある場合に対しても超高性能さを発揮すると期待される Sinc 法に基づく数値解法(Sinc スキーム)を、実際に開発した上で理論動作保証も行うことである。現在の Sinc スキームの状況を表1に示す。

表1. Sinc スキームの難点の状況。

方程式	難点 I	難点 II
積分方程式	解決済	解決済
微分方程式	解決済	解決済
微分・積分方程式	解決済	解決済
特異性をもつ積分方程式	解決済	本研究
特異性をもつ微分方程式	本研究	本研究
特異性をもつ微分・積分方程式	本研究	本研究

表1の上の三つの方程式が特異性をもたない場合、下の三つの方程式が特異性をもつ場合である。特異性をもつ積分方程式に対しては難点(II)が解決されていないため、そこを解決し理論動作保証を完全にさせる。次の特異性をもつ微分方程式や微分・積分方程式に対しては、スキームの開発と理論動作保証を共に行う。また、Sinc 法を適用できる他の問題にも随時取り組み、応用を広げる。

3. 研究の方法

研究代表者は、これまでの研究実績として、特異性のある式(1)に対する高性能な近似公式の開発を行っており、また表1に挙げたように Sinc スキームの難点を特異性がない場合について解決している。本研究では、このようなこれまでの研究代表者の成果に基づき、表1の下の三行に挙げた方程式にも結果を拡張する方法をとる。

ここで重要な点として、特異性のない方程式と特異性がある方程式でスキーム設計の方針が違う部分に注意すべきである。例えば特異性のない積分方程式の場合、積分を不定積分と考えて近似してスキームを導出しているが、特異性がある方程式の場合その方針では難しく、積分を定積分と考えて近似してスキームを導出する必要がある。その違いによって、スキームの理論動作保証の道筋にも違いが現れるので、特異性のない方程式の場合との差分をきちんと把握してギャップを補い論証を進める必要がある。

特異性をもつ積分方程式の場合が解決できれば、特異性をもつ微分方程式や微分・積分方程式の場合は比較的スムーズに研究が進むはずである。ここでのアイデアは、与えられた方程式を積分することで、積分方

式の形に帰着することである．それによって積分方程式に対する研究結果を有効に活用できると期待できる．

ただし理論研究だけでなく，説得力を上げるためには数値実験データによる検証も必須である．特に特異性をもつ方程式は，積分を不定積分でなく定積分と考えると近似することに起因して，特異性をもたない方程式に比べ計算量が必要となる．そのため比較的高性能な計算サーバを構築し実験を行う．

4．研究成果

ほぼ計画通りに研究が進み，以下の成果を得た．

(i)特異性をもつ積分方程式に対する Sinc スキームに対して理論解析を行い，難点(I)と難点(II)を解決した．

(ii)特異性をもつ微分方程式（非整数階微分方程式）の初期値問題に対する Sinc スキームを提案し，また理論解析により難点(I)と難点(II)を解決した．

(iii)特異性をもつ微分・積分方程式の初期値問題に対する Sinc スキームを提案し，また理論解析により難点(I)と難点(II)を解決した．

また，関連するテーマとして，以下の成果も得た．

(iv)式(1)のように，主に代数的な特異性をもつ場合について考えていたが，対数的な特異性をもつ場合について，近似公式の導出およびその誤差評価を与えた．

(v)微分・積分方程式を積分方程式に帰着する際，二重積分が現れるため，特異性をもつ二重積分の近似公式の導出およびその誤差評価を与えた．また，極座標変換と組み合わせた場合の性能評価も行った．

(vi)特異性をもつ多角形領域のラプラシアン固有値の精度保証を行った．

(vii)Sinc 法は境界の取り扱い方法に様々な流儀があるが，それらについて誤差評価を明示的に与えて比較し，どれも大きな違いはないことを示した．

さらに，Sinc 法を有限区間でなく無限区間に適用範囲を広げるための研究も行い，以下の成果を得た．

(viii)半無限区間や全無限区間における Sinc 法による様々な近似公式に対し，精緻な誤差上界を与えた．

(ix)(viii)の応用として，ガンマ関数や，変形 Bessel 関数の精度保証付き数値計算法の開発を行った．

(x)半無限区間において用いられていた変数変換の改善を行い，理論解析により収束性能が向上することを示した．

また Sinc 法より高性能な近似法の開発に関する研究も行い，以下の成果を得た．

(xi)「Hardy 空間」に属する関数に対し，Sinc 法よりも高性能な近似法を開発した．

(xii)(xi)の近似法に基づき，Sinc 法よりも高性能な積分近似公式を開発した．

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 18 件)

K. Tanaka, T. Okayama and M. Sugihara: Potential theoretic approach to design of accurate numerical integration formulas in weighted Hardy spaces, *Approximation Theory XV: San Antonio 2016*, 査読有, 印刷中.

T. Okayama: Error estimates with explicit constants for the Sinc approximation over infinite intervals, *Applied Mathematics and Computation*, 査読有, 印刷中.
DOI: 10.1016/j.amc.2017.02.022

T. Okayama and K. Machida: Error estimate with explicit constants for the trapezoidal formula combined with Muhammad–Mori's SE transformation for the semi-infinite interval, *JSIAM Letters*, 査読有, Vol. 9, 2017, 45–47.
DOI: 10.14495/jsiaml.9.45

K. Tanaka, T. Okayama and M. Sugihara: Potential theoretic approach to design of accurate formulas for function approximation in symmetric weighted Hardy spaces, *IMA Journal of Numerical Analysis*, 査読有, Vol. 37, 2017, 861–904.
DOI: 10.1093/imanum/drw022

鵜島崇, 田中健一郎, 岡山友昭, 杉原正顯: Ganelius 標本点を用いた関数近似公式, *日本応用数学会論文誌*, 査読有, Vol. 27, 2017, 1–20.
DOI: 10.11540/jsiamt.27.1_1

N. Yamanaka, T. Okayama and S. Oishi: Verified error bounds for the real gamma function using double exponential formula over semi-infinite interval, *Lecture Notes in Computer Science*, 査読有, Vol. 9582, 2016, 224–228.
DOI: 10.1007/978-3-319-32859-1_19

T. Okayama: Explicit error bound for modified numerical iterated integration by means of Sinc methods, *Lecture Notes in Computer Science*, 査読有, Vol. 9582, 2016, 202–217.
DOI: 10.1007/978-3-319-32859-1_17

T. Okayama, T. Matsuo and M. Sugihara: Theoretical analysis of Sinc-Nyström methods for Volterra

integral equations, *Mathematics of Computation*, 査読有, Vol. 84, 2015, 1189–1215.
DOI: 10.1090/S0025-5718-2014-02929-3

T. Okayama: Improvement of a Sinc-collocation method for Fredholm integro-differential equations, *AIP Conference Proceedings*, 査読有, Vol. 1648, 2015, No. 390008.
DOI: 10.1063/1.4912618

X. Liu, T. Okayama and S. Oishi: High-precision eigenvalue bound for the Laplacian with singularities, *Computer Mathematics*, 査読有, Part III, Springer Berlin Heidelberg, 2014, 311–323.
DOI: 10.1007/978-3-662-43799-5_23

岡山友昭: 第二種積分方程式に対する Sinc 選点法の改良とその理論解析, *応用数理*, 査読有, Vol. 24, 2014, 110–114.
DOI: 10.11540/bjsiam.24.3_110

T. Okayama: Explicit error bound for the tanh rule and the DE formula for integrals with logarithmic singularity, *JSIAM Letters*, 査読有, Vol. 6, 2014, 9–11.
DOI: 10.14495/jsiaml.6.9

T. Okayama: Error estimates with explicit constants for Sinc quadrature and Sinc indefinite integration over infinite intervals, *Reliable Computing*, 査読有, Vol. 19, 2013, 45–65.
<http://interval.louisiana.edu/reliable-computing-journal/volume-19/reliable-computing-19-pp-045-065.pdf>

K. Tanaka, T. Okayama, T. Matsuo and M. Sugihara: DE-Sinc methods have almost the same convergence property as SE-Sinc methods even for a family of functions fitting the SE-Sinc methods. Part II: Indefinite integration, *Numerische Mathematik*, 査読有, Vol. 125, 2013, 545–568.
DOI: 10.1007/s00211-013-0541-9

T. Okayama, K. Tanaka, T. Matsuo and M. Sugihara: DE-Sinc methods have almost the same convergence property as SE-Sinc methods even for a family of functions fitting the SE-Sinc methods. Part I: Definite integration and function approximation, *Numerische Mathematik*, 査読有, Vol. 125, 2013, 511–543.
DOI: 10.1007/s00211-013-0540-x

T. Okayama, T. Matsuo and M.

Sugihara: Error estimates with explicit constants for Sinc approximation, Sinc quadrature and Sinc indefinite integration, *Numerische Mathematik*, 査読有, Vol. 124, 2013, 361–394.
DOI: 10.1007/s00211-013-0515-y

T. Okayama: A note on the Sinc approximation with boundary treatment, *JSIAM Letters*, 査読有, Vol. 5, 2013, 1–4.
DOI: 10.14495/jsiaml.5.1

岡山友昭: 第二種積分方程式に対する Sinc 法の実用的視点からの理論解析, *日本応用数理学会論文誌*, 査読有, Vol. 22, 2012, 181–212.
DOI: 10.11540/jsiamt.22.3_181

〔学会発表〕(計 29 件)

N. Yamanaka, T. Okayama and S. Oishi: Verified error bounds for the modified Bessel function of the second kind using double exponential formula over semi-infinite interval, *International Workshop on Numerical Verification and its Applications 2017 (INVA 2017)*, 2017 年 3 月 18 日, Hotel Breeze Bay Marina, Japan.

T. Okayama: Recent development of variable transformations combined with the trapezoidal formula, *International Workshop on Numerical Verification and its Applications 2017 (INVA 2017)*, 2017 年 3 月 18 日, Hotel Breeze Bay Marina, Japan.

新宅勇也, 桂浦英佑, 岡山友昭: Sinc 関数近似に用いる半無限区間用 SE 変換の改善と理論誤差評価, *日本応用数理学会 2017 年研究部会連合発表会*, 2017 年 3 月 7 日, 電気通信大学.

原涼太, 岡山友昭: Muhammad-Mori の SE-Sinc 不定積分公式に対する定数を明示的に表した誤差評価, *日本応用数理学会 2017 年研究部会連合発表会*, 2017 年 3 月 7 日, 電気通信大学.

田中健一郎, 岡山友昭, 杉原正顯: 重み付きハーディ空間における高精度数値積分公式の設計, *日本応用数理学会 2016 年度年会*, 2016 年 9 月 12 日, 北九州国際会議場.

杉田幸亮, 杉原正顯, 田中健一郎, 岡山友昭: eye-shaped 領域上の重み付きハーディ空間における 2 つの最適な関数近似公式の比較, *日本応用数理学会 2016 年度年会*, 2016 年 9 月 12 日, 北九州国際会議場.

K. Tanaka, T. Okayama and M. Sugihara: Potential theoretic approach to

approximation in weighted Hardy spaces, The 11th East Asia SIAM Conference (EASIAM 2016), 2016 年 6 月 21 日, University of Macau, China.

N. Yamanaka, T. Okayama and S. Oishi and Y. Maki: Verified algorithm for the modified Bessel function of the second kind, 5th European Seminar on Computing (ESCO 2016), 2016 年 6 月 9 日, Pilsner Urquell Brewery, Czech Republic.

T. Okayama: Error estimates with explicit constants for the Sinc approximation over infinite intervals, 5th European Seminar on Computing (ESCO 2016), 2016 年 6 月 9 日, Pilsner Urquell Brewery, Czech Republic.

山中脩也, 岡山友昭, 大石進一, 槇友佳里: DE 公式を用いた変形 Bessel 関数の精度保証付き数値計算, 日本応用数理学会 2016 年研究部会連合発表会, 2016 年 3 月 5 日, 神戸学院大学ポートアイランドキャンパス.

N. Yamanaka, T. Okayama and S. Oishi: Verified error bounds for the real gamma function using double exponential formula over semi-infinite interval, 6th International Conference on Mathematical Aspects of Computer and Information Sciences (MACIS 2015), 2015 年 11 月 12 日, Zuse Institute Berlin (ZIB), Germany.

T. Okayama: Explicit error bound for modified numerical iterated integration by means of Sinc methods, 6th International Conference on Mathematical Aspects of Computer and Information Sciences (MACIS 2015), 2015 年 11 月 12 日, Zuse Institute Berlin (ZIB), Germany.

岡山友昭, 小城雄輝: 無限区間二次元積分に対する極座標変換と DE 変換を用いた複合台形則の適用への注意, 日本応用数理学会 2015 年度年会, 2015 年 9 月 11 日, 金沢大学角間キャンパス.

K. Tanaka, T. Okayama and M. Sugihara: Potential theoretic approach to design an optimal formula for function approximation in a weighted Hardy space, New Directions in Numerical Computation, 2015 年 8 月 25 日, University of Oxford, England.

田中健一郎, 岡山友昭, 杉原正顯: ポテンシャル論による重み付きハーディ空間上の最適関数近似公式の設計, 第 44 回数値解析シンポジウム, 2015 年 6 月 8 日, ぶどうの

丘, 山梨.

岡山友昭, 町田洸一: Muhammad-Mori の SE 公式に対する定数を明示的に表した誤差評価, 日本応用数理学会 2015 年研究部会連合発表会, 2015 年 3 月 7 日, 明治大学中野キャンパス.

T. Okayama: Improvement of a Sinc-collocation method for Fredholm integro-differential equations, 12th International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics (ICNAAM 2014), 2014 年 9 月 24 日, Rodos Palace Hotel, Greece.

岡山友昭: 第二種 Fredholm 積分方程式に対する Sinc 選点法の事後誤差評価, 応用数学合同研究集会, 2013 年 12 月 19 日, 龍谷大学瀬田キャンパス.

T. Okayama: Sinc-collocation methods for Volterra integro-differential equations, International Conference on Scientific Computation and Differential Equations 2013 (SciCADE 2013), 2013 年 9 月 17 日, University of Valladolid, Spain.

岡山友昭, 田中健一郎: SE-Sinc 法が有効な関数族に対する DE-Sinc 法の収束性について, 日本応用数理学会 2013 年度年会, 2013 年 9 月 9 日, アクロス福岡, 福岡.

²¹ 岡山友昭: Fredholm 微積分方程式に対する Sinc-Nyström 法とその理論解析, 第 42 回数値解析シンポジウム, 2013 年 6 月 14 日, 四国道後館, 愛媛.

²² T. Okayama: Theoretical analysis of a Sinc-Nyström method for Volterra integro-differential equations and its improvement, 18th International Conference Mathematical Modelling and Analysis (MMA2013) and Fourth International Conference Approximation Methods and Orthogonal Expansions (AMOE2013), 2013 年 5 月 29 日, Hotel Dorpat, Estonia.

²³ 岡山友昭: 対数的特異性をもつ積分に対する \tanh 則・DE 公式の定数を明示的に表した誤差評価, 日本応用数理学会 2013 年研究部会連合発表会, 2013 年 3 月 15 日, 東洋大学白山キャンパス.

²⁴ 岡山友昭: 二重指数関数型数値積分公式の誤差の見積もりについて, 日本応用数理学会三部会連携「応用数理セミナー」, 2012 年 12 月 25 日, 東京大学本郷キャンパス.

25 岡山友昭: Sinc 積分と Sinc 不定積分による累次積分近似に対する定数を明示的に表した誤差評価, 2012 年応用数学合同研究集会, 2012 年 12 月 20 日, 龍谷大学瀬田キャンパス.

26 T. Okayama: Error estimates with explicit constants for Sinc quadrature and Sinc indefinite integration over infinite intervals, The 15th GAMM-IMACS International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic and Validated Numerics (SCAN 2012), 2012 年 9 月 27 日, The Institute of Computational Technologies of SB RAS, Russia.

27 岡山友昭: 無限区間の Sinc 関数近似に対する定数を明示的に表した誤差評価, 日本応用数理学会 2012 年度年会, 2012 年 8 月 31 日, 稚内全日空ホテル, 北海道.

28 T. Okayama: Sinc-collocation method for initial value problems by means of the DE transformation, The 16th International Congress on Computational and Applied Mathematics (ICCAM2012), 2012 年 7 月 11 日, Ghent University, Belgium.

29 岡山友昭: 非整数階微分方程式の初期値問題に対する Sinc 選点法, 第 41 回数値解析シンポジウム, 2012 年 6 月 7 日, よろこびの宿 しん喜, 群馬.

〔その他〕

ホームページ等

<http://www.math.info.hiroshima-cu.ac.jp/~okayama/research-ja.html>

6 . 研究組織

(1) 研究代表者

岡山 友昭 (OKAYAMA, Tomoaki)

広島市立大学・大学院情報科学研究科・講師

研究者番号 : 80587866