様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９　（共通）

科研費
KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成２９年　６月１４日現在

機関番号：１３４０１
研究種目：挑戦的萌芽研究
研究期間：2013～2016
課題番号：２５６００１５７

研究課題名（和文）高階偏微分方程式の新種の整数型高確度解法

研究課題名（英文）A new integer-type algorithm for solving higher-order partial differential equations

研究代表者
坂口　文則（Sakaguchi, Fuminori）

福井大学・学術研究院工学系部門・准教授

研究者番号：２０２０５７３５

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　2,600,000円

研究成果の概要（和文）：整数の加減乗除の四則演算のみを用いて、物理学・工学・経済学などで重要な役割を果たす偏微分方程式を非常に高い精度で解く新しい手法の提案と実装を試みた。これは、すでに研究代表者によって提案されている常微分方程式の同様の整数型の解法を、離散数学的手法により、偏微分方程式に拡張したものである。
研究期間内にすべて完全に完成するには至らない点があったが、副産物として、この解法に関して、微分積分分野のこの数値解法が古典整数論と深く関係していることことなど、多くの数学的に興味深い知見が得られ、あらたな展望が生まれた。

研究成果の概要（英文）：A new algorithm by means only of four arithmetic operations among integers was proposed and implemented for solving partial differential equations, which are very important in physics, engineering and economics, with a very high accuracy. This is an extension of a similar integer-type algorithm for ordinary differential equations already proposed by the same principal investigator, by means of some ideas based on discrete mathematics.
Though the implementation has not perfectly been completed, several mathematically interesting facts and new prospects were found about this algorithm. For example, it turned out that this numerical algorithm in the field of analysis (differentiation, integration etc) is closely related to the classical number theory.

研究分野：応用数学・信号処理

キーワード：微分方程式　数値解法　整数論　連分数　超函数

１．研究開始当初の背景
（１）物理学・工学経済学など・経済学などで、常微分方程式や偏微分方程式は大きな役割を果たしている。しかし、それらは、特殊な場合を除き、解析的に（数式変形によって）解くことができない。このため、これまでに数多くの数値解法（計算機で近似的に解を計算する方法）が提案されてきた。

（２）近年、その一つの新しい方法として、研究代表者と連携研究者により、整数の加減乗除の四則演算のみを用いて（そこでは、実数は有理数で近似される）、比較的少ない計算量で常微分方程式を高い精度で解くことのできる方法が提案された（４節＜引用文献＞欄①②）。この方法では、解を有理関数（多項式と多項式の比で表される関数）の波の重ね合わせで近似することになる。また、整数の四則演算だけを用いているので、丸め誤差が出ない（巨大整数をオーバーフローなしに扱うため、十億進数を利用して１つの巨大整数を整数型配列に格納している）。

（３）さらに、上記（２）の方法を利用して、整数の加減乗除の四則演算のみを用いて、微分演算子の固有値を高い精度で求める方法が、同じ研究代表者と連携研究者によって提案されている（４節＜引用文献＞欄③）。

（４）上記（２）の方法は、その構造からして、偏微分方程式への拡張が可能である。

２．研究の目的
（１）１節（２）に挙げた方法を、座標変数が複数ある偏微分方程式に拡張する方法を提案する。

（２）上記（１）の方法を、実際にプログラムに実装する具体的な工夫をする。

（３）上記（２）で作成したプログラムを走らせて実際の数値例で計算を行い、どれだけ誤差が小さいか、どれだけ計算量が少なくて済むか、などの数値性能を調べる。

（４）これらをさらに発展させ、偏微分演算子の固有値を、整数の加減乗除の四則演算のみを用いて、高い精度で解く方法を提案する。

３．研究の方法
（１）１節（２）に挙げた方法を、座標変数が複数ある偏微分方程式に拡張する方法を提案するにあたり、常微分方程式のときにはなかったが偏微分方程式であることにより新たに発生する問題点とその解決法を考える。

①常微分方程式のときは、方程式を表す行列がバンド対角型（対角要素から有限の距離以外では行列要素がすべて０になる）であったが、偏微分方程式では、単純にバンド対角型にはならない。これにより発生する問題を解決するためには、計算の途中で１次独立（他の数列解の重ね合わせでは作れない）な数列解を適宜追加していく必要がある。

②常微分方程式では基底関数（解を構成する波）が互いに関わりをもつ「隣接範囲」が単純な形をしているため、プログラムへの実装が大変容易であったが、偏微分方程式ではこの「隣接範囲」の形状が非常に複雑となり、また方程式の種類に応じて多種多様な形状を持ちうるため、いろんな種類の方程式に汎用的に使えるプログラムを作るためには、かなりの工夫が必要となる。この問題を解決するため、グラフ理論などの離散数学を基礎としたアイデアを駆使し、基底が最初に関わりをもつ順にうまくラベル付けし、ラベル間の関係をうまく記憶するなど、プログラムへの実装において大幅な変更が必要になる。

（２）プログラムへの実装がうまくいったら、解析的に（数式変形のみによって）厳密な正解がわかるような（そういうのは、特殊な場合だが）簡単な数値例について、実際にプログラムによって数値計算を行い、厳密な正解と比較して、数値計算の結果に誤差がどれだけあるか直接調べる。また、かかった計算量の目安として、固定長整数間の乗算回数をカウントし、いかに少ない計算量で精度の良い計算ができるか、誤差の大きさとかかった計算量の関係を調べることにより分析する。

（３）さらに、これらの方法を発展させて、１節（３）で挙げた方法と類似の方法を用いることにより、偏微分演算子の固有値を整数の加減乗除の四則演算のみを用いて高い精度で計算することのできる汎用的な方法を提案する。

（４）線型の偏微分方程式だけでなく、非線型の偏微分方程式を整数の加減乗除の四則演算だけで高い精度で解く方法を提案する。これは、非線型でも非線型性が弱い時には、逐次近似法をもちいることができることに基づく。本研究で使用している基底関数（波）は、それらの間の積がまた別な基底関数の重ね合わせで置き換えることができるという便利な性質をもつため、これは可能である。

４．研究成果
（１）3 節（１）の方法をより詳細に検討することにより、プログラムへの実装方法を実際に提案し、5 節〔学会発表〕欄③で発表した。その具体的な実装方法の一部を図１に示す。

$$\mathrm{for}(j=0;\ j<\infty;\ j{+}{+};)\{_0$$

$$\alpha_p(j) := \#\{\vec{m} | \gamma_p(\vec{m}) = j\}$$

$$\beta_p(j) := \#S_{p^{-1}(j)} - \alpha_p(j)$$

$$\nu_p(j) := \begin{cases} \alpha_p(j) & (j=0) \\ \nu_p(j-1)+\alpha_p(j) & (j \geq 1) \end{cases}$$

$$\mathrm{for}(m=0;\ m<\nu_p(j)-\alpha_p(j)-j;\ m{+}{+};)\{_1$$

$$\tilde{f}_p(m, \nu_p(j)-1) = -\frac{\sum_{\vec{n}\in S_{p^{-1}(j)}\setminus\{q_p^{-1}(\nu_p(j)-1)\}} b^{\vec{n}}_{p^{-1}(j)} f_{\vec{n}}}{b^{q_p^{-1}(\nu_p(j)-1)}_{p^{-1}(j)}}$$

$$\mathrm{for}(\ell=\nu_p(j)-\alpha_p(j);\ell<\nu_p(j)-1;\ell{+}{+};)\{_2$$

$$\tilde{f}_p(m,\ell) = 0$$

$$_2\}$$

$$_1\}$$

$$\mathrm{for}(m=\nu_p(j)-\alpha_p(j)-j;\ m<\nu(j)_p-j-1;\ m{+}{+};)\{_3$$

$$\mathrm{for}(\ell=0;\ \ell<\nu(j)_p;\ \ell{+}{+};)\{_4$$

$$\tilde{f}_p(m,\ell)=\begin{cases} 1 & (\ell=m+j) \\ -\dfrac{b^{q_p^{-1}(m+j)}_{p^{-1}(j)}}{b^{q_p^{-1}(\nu_p(j)-1)}_{p^{-1}(j)}} & (\ell=\nu_p(j)-1) \\ 0 & (\mathrm{otherwise}) \end{cases}$$

$$_4\}$$

$$_3\}$$

$$_0\}$$

隣接範囲：$S_{\vec{j}} = \{\vec{m} \in \mathbb{Z}^2 | b^{\vec{m}+\vec{j}}_{\vec{j}} \neq 0\}$

対称性の中心： $\vec{c} = (-\frac{k+1}{2}, -\frac{k+1}{2})^T (\in \mathbb{R}^2)$

基底番号格子点が基準点となる順番のラベル：全単射 $p : \mathbb{Z}^2 \to \mathbb{Z}^+$

$\vec{m} \in S_{p^{-1}(n)}$ となるような最小の非負整数 n : $\gamma_p(\vec{m})$

基底番号格子点が接触を持つ順番のラベル：全単射 $q_p : \mathbb{Z}^2 \to \mathbb{Z}^+$

j ステップ目で初めて接触を持つ基底番号格子点の個数：$\alpha_p : \mathbb{Z}^+ \to \mathbb{Z}^+$

j ステップ目ですでに接触を持っている $S_{p^{-1}(j)}$ の元の個数:$\beta_p : \mathbb{Z}^+ \to \mathbb{Z}^+$

j ステップ目までに接触をもった基底番号格子点の総数：$\nu_p : \mathbb{Z}^+ \to \mathbb{Z}^+$

展開係数：$\tilde{f}_p : \mathbb{Z}^{+2} \to \mathbb{Q}$

図１　偏微分方程式の整数型解法の実装法の一部

さらに、基底関数の対称性を考慮して、より少ない計算量でより小さな誤差しか出ないような実装法の改良も行ったが、それは図 1 よりはるかに煩雑なものとなった。これらをプログラムに実装し、3 節（２）の方法を目指したが、その煩雑ゆえプログラムのバグが取り切れず、残念ながら、研究期間内に計算を間に合わせることができなかった。しかしながら、本節（２）～（５）で述べるように、副産物として、この微分方程式の整数型解法に関して数多くの貴重な発見が得られ、本研究が意外な分野との関わりをもっていることが次々に判明するなど、多くの新たな展望が生まれた。

（２）本研究やそのもととなった１節（２）で挙げた研究代表者と連携研究者による整数型解法で整数の四則演算のみを用いた当初の理由は、この方法がほとんど平行に近い複数の数列解の重ね合わせを何度も取り直すため、「桁落ち」を防ぐため丸め誤差を皆無にするためであり、当初は古典整数論との関係を狙ったものでは全くなかった。しかしながら、研究を続けるうちに、この整数型解法がいろんな意味で古典整数論と深い関連をもつことが次々に明らかになった。

①この整数型解法では、混入してくる余剰解（詳しくは本節（４）参照）を除去するために、発散に敏感な内積に関して複素整数ベクトル（成分がすべてガウス整数のベクトル）の近似直交化利用しているが、この整数ベクトルの近似直交化のプロセスは古典整数論のユークリッド互除法と非常によく似ており、いわばユークリッド互除法の複素多次元・多ベクトル版とでもいうべきものになっている。このことは以前からうすうす気が付いていたが、余剰解の効率的な除去という実用的な面ばかりに注目していたので、それがそれほど重要なこととは考えていなかった。しかしながら、次の②で述べる連分数との関連が経験的に判明してから、このユークリッド互除法との類似を古典整数論的な視点から捉えなおしたほうが良いことがわかってきた。

②この整数型解法で得られる展開係数（それぞれの波のウェイト）は有理数で近似されているが、それらの間の比（これらももちろん有理数）が、真の比の正準型の連分数（例えば＜引用文献＞欄④参照）の近似子（収束子）に一致するか、一致しなくても極めて近いものになっている場合が非常に多い（つまり、分母分子の整数の桁数が少ないのに真の比を非常によく近似する有理比が得られている）ことが、経験的な分析により次第に明らかとなってきた。これについては、５節〔学会発表〕欄③④で発表済みである。よく知られているように、正準型の連分数はユークリッド互除法と深い関連があるが、上記①における整数ベクトルの近似直交化において展開係数そのものをユークリッドの互除法にかけているわけではないので、この現象が現れる原因は現在のところ不明である。しかしながら、何らかの古典整数論的な要因が関与しているのは間違いないと考えられる。今後、この原因の解明が待たれる。

③同じく連分数に関しては、むしろ連分数との関連を積極的に利用することにより、１節（３）で挙げた整数型の固有値計算法の数値性能を上げることができることが判明した。

具体的には、これまで固有値の近似値の候補として、十進小数型の有理数（つまり、分母が１０の冪の有理数）を用いてきたが、その代わりに連分数の近似子などを用いることにより、約半分の桁数の整数を分母分子にもつ有理比（したがって、計算量も約４分の１に減る）で非常に精度よく固有値を近似計算する方法を提案した。シュレーディンガー作用素の例についてこの方法を用いた結果を図２に示す、横軸は線形補間の反復回数、縦軸は真の固有値と一致した有効数字桁数（青丸）と近似子の階数（赤丸）である。この結果は、2 次収束していることを示しており、ごく普通のパソコンで計算して反復９回目で有効数字は 400 桁をゆうに超えている。これについては、５節〔学会発表〕欄④で発表済みである。

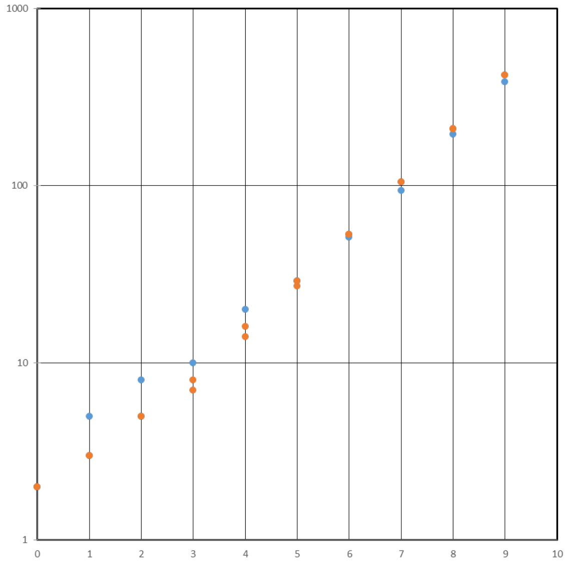

図２　連分数を利用した整数型固有値計算法の数値性能

（３）この整数型解法では（１）で上述したように余剰解除去のために複素整数ベクトルの近似直交化を利用しているが、ほとんど平行に近い数列解の間でこれを普通の意味で行うためには、数列解の間の厳密な内積行列の計算が必要であるが、これは比較的計算量が嵩む。従来の方法では、近似直交化の度ごとにこの内積行列の計算を行うのではなく、初回だけ行ってあとは１次結合の取り直しのとき使用する係数を用いて内積行列の高速自動更新を行っていた。しかし、たとえ初回だけでも内積行列の計算は計算量が嵩む。この問題を解決するため、数列解が平行に近い間は近似直交化問題を１-ノルム最小化問題で代用し、数列解の１次独立性が数値的に十分良くなった段階で有限精度の近似直交化に切り替えるという方法により、同じ数値精度で計算量の大幅な削減に成功した。これについては、５節〔学会発表〕欄②で発表済みである。本研究の目的である偏微分方程式の整数型解法の場合には、１次独立な数列解の個数が多く、しかもそれらが次第に増えていくため、従来法での内積行列の厳密計算では多大な計算量が必要になるが、この代用により、この問題をクリアできる。

（４）本研究やそのもととなった１節（２）で挙げた研究代表者と連携研究者による整数型解法には、常微分方程式のノルム有限（エネルギー有限）な真の解に対応する数列解以外に、多数の余剰解が混入することが経験的にわかっていた（その効率的な除去方法については（１）で述べた）。その中には、ノルム有限でない常微分方程式の真の解に対応する数列解も含まれるが、それ以外に特異な振舞いをする数多くの１次独立な数列解が存在することが経験的にわかっていた（これらはいずれも上記の方法で除去できる）。後者の正体を知っておくことは、より効率的な除去のために有用と考えられる。この整数型解法では数列解は複素整数ベクトルであり、厳密な整数数列を「解読」することが可能な場合があり、実際、非常に簡単な形の微分方程式のいくつかの例については解読が成功し、後者の正体不明だった数列解成分の正体が、無限遠点や微分方程式の特異点にサポートをもつ超函数解に対応する数列解であることが、複素関数論の１次分数変換を利用することにより判明した。また、同じ１次分数変換により、それらの超函数解が本当に微分方程式を満たすものであることも、確認した。これについては、５節〔学会発表〕欄①で発表済みである。超函数解に対応する数列解が得られている例を、表１に示す。これらの発見は、この整数型解法が代数解析学とも接点をもつことを示唆するものである。

元の ODE	k_0	整数型解法で得られた数列解 $\tilde{f}_{\tilde{n}}$ （注 a,b）(定数倍省略)	対応する $\tilde{f}(\tilde{z})$ (定数倍省略)	対応する $f(x)$ (定数倍省略)	Type
$f'=0$ (注 c)	0	$\mathrm{sgn}(\tilde{n}+\frac{1}{2})i$	$\frac{1}{1-\tilde{z}}$	1（解析解）	I
		1	$\delta(\tilde{z}-1)$	(singular)	II
	1	$(\tilde{n}+1)\mathrm{sgn}(\tilde{n}+1)$	$\frac{1}{(1-\tilde{z})^2}$	1（解析解）	I
		1	$\delta(\tilde{z}-1)$	(singular)	II
		$(\tilde{n}+1)i$	$\delta'(\tilde{z}-1)$	(singular)	II
	2	$\frac{(\tilde{n}+1)(\tilde{n}+2)}{2}\mathrm{sgn}(\tilde{n}+\frac{3}{2})i$	$\frac{1}{(1-\tilde{z})^3}$	1（解析解）	I
		1	$\delta(\tilde{z}-1)$	(singular)	II
		$\frac{(\tilde{n}-1)(\tilde{n}+2)}{2}$	$\delta''(\tilde{z}-1)$	(singular)	II
$(x^2+9)f'+2xf=0$ (注 d)	0	$(\frac{1}{2})^{\lfloor\lvert\tilde{n}+\frac{1}{2}\rvert\rfloor}\mathrm{sgn}(\tilde{n}+\frac{1}{2})i$	$\frac{\tilde{z}-1}{(2\tilde{z}-1)(\tilde{z}-2)}$	$\frac{1}{x^2+9}$	真解
		$(\frac{1}{2})^{\lfloor\tilde{n}+\frac{1}{2}\rfloor}+(\frac{1}{2})^{\lfloor-(\tilde{n}+\frac{1}{2})\rfloor}$	$\delta(\frac{\tilde{z}}{2}-1)+\delta(2\tilde{z}-1)$	(singular)	II
		$\left((\frac{1}{2})^{\lfloor\tilde{n}+\frac{1}{2}\rfloor}-(\frac{1}{2})^{\lfloor-(\tilde{n}+\frac{1}{2})\rfloor}\right)i$	$\delta(\frac{\tilde{z}}{2}-1)-\delta(2\tilde{z}-1)$	(singular)	II
	1	$(\frac{1}{2})^{\lvert\tilde{n}+1}$	$\frac{1}{(2\tilde{z}-1)(\tilde{z}-2)}$	$\frac{1}{x^2+9}$	真解
		$(\frac{1}{2})^{\tilde{n}+1}+(\frac{1}{2})^{-(\tilde{n}+1)}$	$\delta(\frac{\tilde{z}}{2}-1)+\delta(2\tilde{z}-1)$	(singular)	II
		$\left((\frac{1}{2})^{\tilde{n}+1}-(\frac{1}{2})^{-(\tilde{n}+1)}\right)i$	$\delta(\frac{\tilde{z}}{2}-1)-\delta(2\tilde{z}-1)$	(singular)	II

注 a：数列解に表式において $\lfloor a\rfloor$ の記号は a を超えない最大整数を表す。
注 b：対称性の中心（ゼロ周波数）は $\psi_{k_0,\tilde{n}}$ の定義より $\tilde{n}=-\frac{k_0+1}{2}$ であることに注意。
注 c：$\tilde{f}(\tilde{z})$ の満たすべき方程式は $\left((\tilde{z}-1)^2\frac{d}{d\tilde{z}}+(k_0+1)(\tilde{z}-1)\right)\tilde{f}(\tilde{z})=0$。
注 d：$\tilde{f}(\tilde{z})$ の満たすべき方程式は $\left((2\tilde{z}-1)(\tilde{z}-2)\frac{d}{d\tilde{z}}+\frac{(k_0+1)(2\tilde{z}-1)(\tilde{z}-2)}{\tilde{z}-1}+\frac{\tilde{z}+1}{\tilde{z}-1}\right)\tilde{f}(\tilde{z})=0$

表１　超函数解に対応する数列解が得られている例

（５）上記（４）に基づくさらなる分析により、この整数型解法が、数値解法でありながら解析解法の性格を併せもつ、厳密な差分方程式に基づく一種の「数論解法」とでも呼ぶべきものになっていることが、ごく最近明らかになった。したがって、この整数型解法が、

有理数体の代数拡大とも深い関連を持っていることが明らかになりつつある。

＜引用文献＞

① F. Sakaguchi and M. Hayashi, "General Theory for Integer-Type Algorithm for Higher Order Differential Equations", Numerical Functional Analysis and Optimization, vol.32, no.5, pp541-582 (2011).

② F. Sakaguchi and M. Hayashi, "Practical Implementation and Error Bound of Integer-Type Algorithm for Higher-Order Differential Equations", Numerical Functional Analysis and Optimization, vol.32, no.12, pp. 1316-1364 (2011).

③ 坂口文則・林正人、「シュレーディンガー方程式の固有値問題の整数型高確度解法」, 日本数学会 2010 年度年会応用数学分科会講演アブストラクト集 (2010).

④ 高木貞治「初等整数論講義」、共立出版、(1971)

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）

〔学会発表〕（計４件）

① 坂口 文則、「微分方程式の整数型解法に現れる余剰解の超函数成分について」2017 年度 日本数学会 年会 応用数学分科会、2017 年 3 月 26 日（首都大学東京）

② 坂口 文則、「1-ノルム最小化を用いた微分方程式の整数型解法の計算量削減」2016 年度 日本数学会 秋季総合分科会 応用数学分科会、2016 年 9 月 18 日（関西大学）

③ 坂口 文則、「ベクトルの準直交化を用いた線型偏微分方程式の整数型解法の実装」2015 年度 日本数学会 年会 応用数学分科会、2016 年 3 月 19 日（筑波大学）

④ 坂口 文則、「ベクトルの準直交化を用いた微分方程式の整数型解法と収束の速い一般化連分数との 2 つの接点」2015 年度 日本数学会 秋季総合分科会 応用数学分科会、2015 年 9 月 15 日（京都産業大学）

６．研究組織

(1)研究代表者
坂口 文則 （SAKAGUCHI, Fuminori）
福井大学・学術研究院工学系部門・准教授
研究者番号：20205735

(3)連携研究者
林 正人 （HAYASHI, Masahito）
名古屋大学・大学院多元数理科学研究科・教授
研究者番号： 40342836