

熱方程式の精度保証付き数値計算

明治大学 総合数理学部 現象数理学科 池田研

1. 研究背景 : 数値計算誤差の厳密評価

コンピュータ技術の発展により数値計算の内容は大規模化、多様化が進んでいる。しかしながら、計算機はその構造上、有限桁の数値しか扱えない。そのため、数値計算における誤差の混入を避けることは難しい。ここで、数値計算における誤差は次の三つに分類できる。一つ目は、数値計算のもとになる数学モデルが現象を正しく記述できていないことに起因する打ち切り誤差。二つ目は、極限計算などの計算機で実現不可能なことに起因する打ち切り誤差。三つ目は、計算機内で扱える数値が有限桁であるために生じる丸め誤差である[3]。そこで、数値計算における丸め誤差と打ち切り誤差に厳密に評価する方法が考案された。数値計算において生じるこのような誤差に対して、丸め誤差の厳密評価と新たな数値計算アルゴリズムの開発により、問題の解の誤差を数学的に厳密に評価する数値計算法を、精度保証付き数値計算という。この精度保証付き数値計算を用いて偏微分方程式の解の存在と誤差限界を調べる試みが盛んに行われている[4]。

2. 研究目的

本研究では次の問題を考える。

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = (1 + \nu\pi^2 t) \sin(\pi x) & \text{in } \Omega \times J, \\ u(x, t) = 0 & \text{on } \partial\Omega \times J, \\ u(x, 0) = 0 & \text{on } \Omega. \end{cases} \quad (1.1)$$

ここで、 ν は正定数、 $\Omega = (0, 1)$ 、 $T > 0$ に対して $J = (0, T)$ とする。本研究の目的は以下の二つである。

目的1: 熱方程式に対して精度保証付き数値計算を行うことにより、数値計算の誤差を厳密に評価する。

目的2: パラメータ ν や時間 T と誤差限界には、どのような関係があるのか数値実験によって調べる

3. 研究手法 : 精度保証付き数値計算実装の準備

本研究では、有限要素法により求めた近似解をもとに、先行研究[1]に従い(1.1)と同値な残差方程式を導き、誤差限界を与える式を導出した。誤差限界を実際に求める際には、(1.1)の左辺の微分作用素をまとめて定義した作用素 \mathcal{L}_t の逆作用素のノルム $\|\mathcal{L}_t^{-1}\|$ の評価と残差 ε が重要になる。先行研究[1]で与えられた逆作用素のノルム評価を与える定理を用いる。

3.1. 近似解の計算

有限要素法によって求めた近似解の概形を図1に記す。近似解はMATLABを用いて計算した。

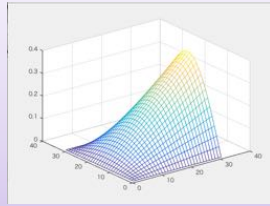


図1: 近似解の概形

残差方程式を求めるときに必要

3.2. 残差方程式と誤差評価

誤差限界を求める式の導出

(1.1)の近似解 u_h^k を用いて、 $u = w + u_h^k$ とおけば、(1.1)と同値な以下の残差方程式を得る

$$\begin{cases} \frac{\partial w}{\partial t} - \nu \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = \varepsilon & \text{in } \Omega \times J, \\ w(x, t) = 0 & \text{on } \partial\Omega \times J, \\ w(x, 0) = 0 & \text{on } \Omega. \end{cases} \quad (1.2)$$

ここで、 ε は $u - u_h^k$ に近づく残差。左辺の微分作用素をまとめて \mathcal{L}_t と定義すれば、 $w = \mathcal{L}_t^{-1}\varepsilon$ とかける。 w のノルムは

$$\|w\|_{L^2(J; H_0^1(\Omega))} \leq \|\mathcal{L}_t^{-1}\| \|\varepsilon\|_{L^2(J; L^2(\Omega))} \quad (1.3)$$

と評価できるので、誤差限界 α を右辺で定義する。

$$\alpha \equiv \|\mathcal{L}_t^{-1}\| \|\varepsilon\|_{L^2(J; L^2(\Omega))} \quad (1.4)$$

誤差限界は、 α の右辺の積を精度保証付き数値計算することにより求められることがわかった。本研究の目的1がこの α を求めることに変わった。

3.3. $\|\mathcal{L}_t^{-1}\|_{\mathcal{L}(L^2(J; L^2(\Omega)), L^2(J; H_0^1(\Omega)))}$ の評価

$\|\mathcal{L}_t^{-1}\|$ の評価式の導出

誤差限界 α が \mathcal{L}_t の逆作用素のノルムと残差 ε のノルムの積で与えられることがわかったので、具体的に逆作用素のノルムの評価を与える。その際、先行研究[1]で与えられた定理を用いる。

$$\|\mathcal{L}_t^{-1}\| \leq \frac{1}{\nu} (C_p + 2C_\Omega(h)) + 2C_{inv}(h)C_J(k)$$

と評価を得る。ここで C_p はポアンカレ定数。本研究では、 $C_\Omega(h) = h/\pi$ 、 $C_{inv}(h) = \sqrt{12}h^{-1}$ 、 $C_J(k) = k/\pi$ とした。これらの定数は、幾つかの誤差評価を満たす定数であり、空間または分割数によって決まる。つまり、 $\|\mathcal{L}_t^{-1}\|$ は定数で評価できることが導かれた。よって α は残差 ε により決定される。

最終的に、求めるべき α の値はある定数と残差 ε の積の精度保証付き数値計算により求まることになる。

4. 数値計算結果

実験結果1: 誤差限界 α と時間 T の関係

区間演算によって得られた α と T の関係を図 1.2 に記す。ここで、分割数 m, n はともに100とし、 $T = 1.0$ とした。

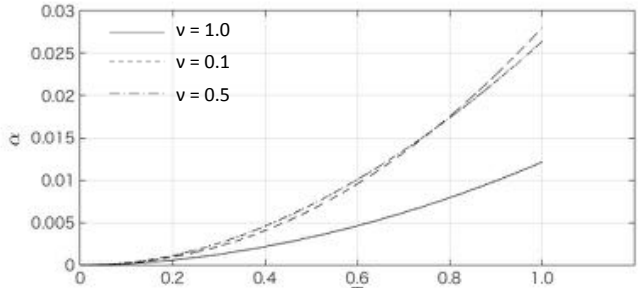


図 1.2: α と T の関係, $m=n=100$

結果1の考察

ν の値が大きい方が $\|\mathcal{L}_t^{-1}\|$ が小さくなり、誤差限界 α も小さくなる。

式(1.3)の右辺は、 ν の値に反比例している、ということを実験によって再現することができた。また、どの場合においても、時間 T が増加するにつれて α の値が大きくなるのがわかる。長時間においても効果的かつ、より精度よく精度保証付き数値計算が実現可能なアルゴリズムの開発は今後の重要な課題である。

実験結果2: 誤差限界 α と分割数の関係

次に、空間方向の分割数 n 、時間方向の分割数 m と $\alpha, \|\varepsilon\|$ との関係を表 1.1 にまとめた。(a) は n を固定し、 m を20から2倍ずつ増やした表。(b) は m を固定し、 n を20から2倍ずつ増やした表である。

表 1.1: 分割数を変えたときの関係, $T=1.0, \nu=1.0$

(a): $m = 20, n = 20, 40, 80, 160, 320$			(b): $n = 20, m = 20, 40, 80, 160, 320$		
n	$\ \varepsilon\ $	α	m	$\ \varepsilon\ $	α
20	1.1169E-01	0.2879	20	1.1169E-01	0.2879
40	8.3375E-02	0.3878	40	9.4267E-02	0.1281
80	6.6653E-02	0.6024	80	8.2955E-02	0.0670
160	5.8195E-02	1.0400	160	7.7510E-02	0.0412
320	5.4065E-02	1.9199	320	7.4787E-02	0.0295

結果2の考察

残差が減少しても、誤差限界は一概には減少するとは限らない。

(a)において、空間方向の分割数を増やしたとき、残差 $\|\varepsilon\|$ は減少しているのに対して、誤差限界 α は増加していることが分かった。これは(1.4)において、 $C_{inv}(h) = \mathcal{O}(h^{-1})$ なので $\|\mathcal{L}_t^{-1}\|$ の評価が増大したからだと考えられる。

(b)においては、時間方向の分割数を増やした時、(a)とは異なり、残差が減少するにつれて誤差限界 α 減少している。これは(a)の場合と同じように考えれば、 $C_J(k) = \mathcal{O}(k)$ なので、 $\|\mathcal{L}_t^{-1}\|$ の評価が減少するためである。

5. 結論

1. 精度保証付き数値計算を行い、誤差限界を求めることができた。

本研究においては、誤差限界を求めることは定数を決定すること、積の精度保証付き数値計算を行うことに帰結できた。

2. 分割数を増やせば誤差限界が減少するというわけではない。

時間が長くなるにつれて誤差限界は増加する。

誤差限界 α が、 ε だけによるのではなく、逆作用素のノルム評価の影響も大きいことがわかった。

6. 今後の課題

Burgers方程式に対して精度保証付き数値計算を行う。

本研究では非同次熱方程式に対して検証を行ったが、先行研究[1]では、より一般の非線形放物型初期値境界問題に対して、精度保証付き数値計算を行った結果が紹介されていた。本来、精度保証付き数値計算とは、誤差限界の数学的に厳密な評価のみならず、方程式の解の存在証明も行える。その際には残差方程式から不動点定理を行い、Schauderの不動点定理などの不動点定理を用いて解の存在証明を行うのである。今回学んだことを活かし、今後は非線形方程式に対しても精度保証付き数値計算を実装できるように研究を続ける。

本研究では、S.M.Rump教授によって開発されたINTLABという区間演算ライブラリを用いて精度保証付き数値計算を実装した。INTLABとはMATLABのtoolboxとして開発されており、MATLABに追加してインストールすることにより、精度保証付き数値計算を実現することができる。

参考文献

- [1] 中尾充宏, 木村拓海, 木下武彦(2012)「放物型初期値境界問題の数値解に対する精度保証について」, 数理解析研究所講義録
- [2] Takehiko Kinoshita, Takuma Kimura, Mitsuhiro T. Nakao(2012)「On the a posteriori estimates for inverse operators of linear parabolic equations with applications to the numerical enclosure of solutions for nonlinear problems」, RIMS Preprints Number No.1754
- [3] 中尾充宏, 渡部善隆(2011)「実例で学ぶ精度保証付き数値計算」, サイエンス社
- [4] 中尾充宏, 山本野人(1998)「精度保証付き数値計算」, 日本評論社
- [5] M.T. Nakao, Constructive A Priori Error Estimates For A Full Discrete Approximation Of The Heat Equation(2013), SIAM J. Numer. Anal. Vol 51, No.3, pp.1525-1541