

半群理論を利用する発展方程式に対する解の 精度保証付き数値計算

高安亮紀 (筑波大学システム情報系)*

1. はじめに

「精度保証付き数値計算」は数学的に正しい結果を数値計算によって導く手法全般を指し、近年では数値計算結果の品質保証だけでなく、計算機を援用する数学解析手法も「精度保証付き数値計算」と呼ぶ。本稿では、いくつかの時間発展を伴う偏微分方程式を考え、その初期値境界値問題の解を半群理論を用いて精度保証付き数値計算する方法について紹介する。

偏微分方程式に対する解の精度保証付き数値計算法は中尾 [11], Plum [15] がそれぞれ独立に開発し、彼らに影響を受けた多くの研究者により発展を続けている（例えば [1, 4, 16, 19, 23, 24] など）。これらは楕円型偏微分方程式（あるいは境界値問題として捉える偏微分方程式）に対する解の精度保証付き数値計算が多い¹。精度保証付き数値計算の基本方針は数値計算で得られた近似解の近傍で、適切な（かつ計算機で表現可能な）関数空間の部分集合を作り、その集合において不動点定理の成立を数値検証する。我々が精度保証付き数値計算を行う際に考える事は主に以下である。

- どんな近似解を数値計算によって用意するか？
- 不動点定理の成立を見込む写像および不動点の属する関数空間をどうするか？
- 不動点定理の成立条件を数値検証可能な形に表現できるか？

上の文章を数式化してみる。いま $(X, \|\cdot\|_X)$, $(Y, \|\cdot\|_Y)$ を Banach 空間とし、写像 F を X （あるいはその部分集合）上で定義され値を Y にもつ非線形作用素とする。このとき次の非線形作用素方程式を考える。

$$\text{Find } x \in X \text{ such that } F(x) = 0 \text{ in } Y. \quad (1)$$

ほとんどの偏微分方程式は (1) の作用素方程式に帰着され、この解の存在を数値検証することが偏微分方程式の解の存在検証と同値となる。いま数値計算で得られた近似解を $\tilde{x}$ とする。近似解は Banach 空間 X の有限次元部分空間 X_h (h は近似パラメータ) に属すとし、 $\tilde{x}$ の近傍を

$$B(\tilde{x}, \rho) := \{x \in X : \|x - \tilde{x}\|_X \leq \rho\}$$

とする。精度保証付き数値計算ではある作用素 $T : X \rightarrow X$ を用意し（不動点形式とも呼ばれる）、この T が $B(\tilde{x}, \rho)$ 内で不動点をもつことを数値検証する。作用素 T の選び

本研究は科研費 (課題番号:15K17596) の助成を受けたものである。

キーワード：精度保証付き数値計算, 非線形放物型方程式, 半群理論, Fourier 級数展開

* 〒1305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1

e-mail: takitoshi@risk.tsukuba.ac.jp

¹ 楕円型偏微分方程式を対象とする成果が多いが、これらは時間発展する偏微分方程式を対象に考えた先行研究もある。例えば [5, 8, 12, 13] など参照せよ。

方は任意であるが、 T が縮小写像となり不動点をもつことを見込んで構成する。例として $\mathbb{R}^n$ 上の常微分方程式系

$$\frac{dx(t)}{dt} = f(x(t), t) \quad (t > 0), \quad x(0) = x_0$$

に対する Picard 型作用素

$$T(x) = x_0 + \int_0^t f(x(s), s)ds, \quad X = C([0, t]; \mathbb{R}^n)$$

や、もっと抽象的に作用素方程式 (1) に対する簡易ニュートン写像

$$T(x) = x - AF(x), \quad A: Y \rightarrow X \text{ (injective)}$$

などがある。関数空間 X 、作用素 T を適切に選んだら、 $B(\tilde{x}, \rho)$ 上での **Banach** の不動点定理（あるいはその他の不動点定理）の成立条件を数値検証可能な形に定式化する。このような成立条件は Kantorovich による Newton 法の半局所的収束定理（**Newton-Kantorovich** の定理）に代表され、今日では偏微分方程式に対する解の精度保証付き数値計算の核を成している。

以下では具体的な方程式を考え、関数空間 X 、作用素 T を明記したのち、 $B(\tilde{x}, \rho)$ 上での不動点定理の成立条件を明記した解の数値検証のための定理を紹介する。

2. 解析半群を用いる精度保証付き数値計算法

本節では、 $J := (t_0, t_1] \subset \mathbb{R}$ ($0 \leq t_0 < t_1 < \infty$)、 $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ を多面体領域 ($d = 1, 2, 3$) とし、次のような非線形放物型方程式の初期値境界値問題を考える²。

$$\begin{cases} \partial_t u - \Delta u = f(u) & \text{in } J \times \Omega, \\ u(t, x) = 0, & t \in J, \quad x \in \partial\Omega, \\ u(t_0, x) = u_0(x), & x \in \Omega. \end{cases} \quad (2)$$

ここで $\partial_t = \frac{\partial}{\partial t}$, $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \cdots + \frac{\partial^2}{\partial x_d^2}$, f は $\mathbb{R}$ 上の写像で $\phi \in H_0^1(\Omega)$ に対して、 $f \circ \phi \in L^2(\Omega)$ となると仮定し、この意味で 2 階 Frechét 微分可能であるとする。さらに $u_0 \in H_0^1(\Omega)$ は与えられた初期関数である。境界条件を考慮すると作用素 Δ の定義域は $D(\Delta) = H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$ である。このとき $\varphi \in D(\Delta)$, $\phi \in H_0^1(\Omega)$ に対して、

$$|(-\Delta\varphi, \phi)_{L^2}| \leq \|\varphi\|_{H_0^1} \|\phi\|_{H_0^1}, \quad (-\Delta\varphi, \varphi) \geq \|\varphi\|_{H_0^1}^2$$

が成り立つことと、 $-\Delta$ が $L^2(\Omega)$ において $D(A)$ で稠密に定義された閉作用素である事実から Δ が Sectorial 作用素となり、すなわち $L^2(\Omega)$ において解析半群 $\{e^{t\Delta}\}_{t \geq 0}$ を生成する [14, 22]。そして次の $u(t) \equiv u(t, \cdot)$ に関する積分方程式を考える。

$$u(t) = e^{(t-t_0)\Delta} u_0 + \int_{t_0}^t e^{(t-s)\Delta} f(u(s))ds, \quad t \in J. \quad (3)$$

² 紙面の都合で L^p 空間 (p 乗 Lebesgue 可積分関数全体), $H^m (= W^{m,2})$ 空間 (L^2 の m 次 Sobolev 空間) 等の定義を省略したが、「通常の記号」を使っていないときは注意する。

もしも関数 u が (2) の解ならば, $e^{(t-s)\Delta}$ を $\partial_t u(s) - \Delta u(s) = f(u(s))$ にかけて $s \in (t_0, t)$ で積分し, $\frac{d}{ds} (e^{(t-s)\Delta} u(s)) = e^{(t-s)\Delta} (\partial_t u(s) - \Delta u(s))$ という関係を使うと (3) を得る. いま (3) を満たし, $u \in C(J; L^q(\Omega))$ となる関数を (2) の **mild solution** という³.

我々が [10] において構築した非線形放物型方程式に対する解の精度保証付き数値計算法では上記の mild solution を $X = L^\infty(J; H_0^1(\Omega))$ の関数空間で数値検証する⁴. このとき上述の作用素 T は (3) の右辺で定義する. この T は上の Picard 型作用素のように適切な関数空間で縮小写像となることが知られている. そして数値計算で得られた近似解を $\tilde{u}$ とし, 近似解の近傍 $B_J(\tilde{u}, \rho)$ において解の存在を検証する. 実際の計算では $z = u - \tilde{u}$ とし (3) と同値な不動点形式

$$(S(z))(t) := e^{(t-t_0)\Delta}(u_0 - \tilde{u}(0)) + \int_{t_0}^t e^{(t-s)\Delta} (f(u(s)) - \partial_t \tilde{u}(s) + \Delta \tilde{u}(s)) ds$$

を考え, この写像が $B_J(0, \rho)$ 内に不動点 $z(= S(z))$ をもつことを数値検証する.

以上をまとめると数値検証のための局所存在定理は次のように与えられる. 注目すべきは定理の成立条件が数値計算によって検証可能な点である.

定理 2.1 (Theorem 3.2 in [10]). 放物型問題 (2) を考える. 初期関数 u_0 に対して, $\|u_0 - \tilde{u}(t_0)\|_{H_0^1} \leq \varepsilon_0$ が成り立つとし, 数値計算で得られた近似解 $\tilde{u}$ が

$$\left\| \int_{t_0}^t e^{(t-s)\Delta} (\partial_s \tilde{u}(s) - \Delta \tilde{u}(s) - f(\tilde{u}(s))) ds \right\|_{L^\infty(J; H_0^1(\Omega))} \leq \delta$$

をみたすとする. さらに $y \in B_J(\tilde{u}, \rho)$ における $f : H_0^1(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$ の Frechét 微分に対して, ある非減少関数 $L : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ が存在し, 次をみたす.

$$\|f'[y]u\|_{L^\infty(J; L^2(\Omega))} \leq L(\rho)\|u\|_{L^\infty(J; H_0^1(\Omega))}, \quad \forall u \in L^\infty(J; H_0^1(\Omega)).$$

このとき, もし $\rho > 0$ が

$$\varepsilon_0 + \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda_{\min} e}} \operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{\lambda_{\min} \tau}{2}}\right) L(\rho)\rho + \delta < \rho$$

をみたすならば, (2) の mild solution が $B_J(\tilde{u}, \rho)$ 内に局所一意存在する. ただし, $\lambda_{\min}$ は $-\Delta$ に斉次 Dirichlet 境界条件を付与した際の最小固有値, $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-s^2} ds$, $\tau := t_1 - t_0$ をそれぞれ表すとする.

数値計算で得られた近似解として, 我々は [10] において空間変数に対して Fourier 基底で張った有限次元部分空間 V_N を利用した. この部分空間は $V_N \subset D(\Delta)$ となり, 上の定理における $\Delta \tilde{u}$ は意味を持つ. しかし, 領域等の制限により低次の有限要素空間を有限次元部分空間 V_h に採用した場合, $V_h \not\subset D(\Delta)$ となり残差評価が意味を成さなくなる. この場合, 広い意味での 2 階微分を考える必要があり, [9] でこれを紹介した.

いま $H^{-1}(\Omega)$ を $H_0^1(\Omega)$ の双対空間とし, $\langle \cdot, \cdot \rangle$ を $H^{-1}(\Omega)$ と $H_0^1(\Omega)$ の双対積とする. さ

³ mild solution が (2) の解となるかは $f(u)$ 次第であるが, $f(u) = |u|^{p-1}u$ のような典型的な非線形項に対しては成り立つ p の範囲が得られている. 今回はその様な $f(u)$ で考える. 詳しくは [17] を参照せよ.

⁴ 半群の連続性から, $C(J; L^2(\Omega))$ での検証にもなっている.

らに双線形形式 $a : H_0^1(\Omega) \times H_0^1(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}$ を $a(v, w) := (\nabla v, \nabla w)$ で定義する. このとき作用素 $\mathcal{A} : H_0^1(\Omega) \rightarrow H^{-1}(\Omega)$ を $\langle \mathcal{A}v, w \rangle := a(v, w)$ で定義すると $D(\mathcal{A}) = H_0^1(\Omega)$ である. そして $x \in D(\mathcal{A})$ とある正の数 λ_0 に対して, $\mathcal{A}$ が

$$\langle -\mathcal{A}x, x \rangle \leq 0, \quad R(\lambda_0 I + \mathcal{A}) = H^{-1}(\Omega)$$

が成り立つとき $-\mathcal{A}$ は $H^{-1}(\Omega)$ において解析半群 $\{e^{-t\mathcal{A}}\}_{t \geq 0}$ を生成する [14]. すると残差評価を $H^{-1}(\Omega)$ の空間で評価できることになり, 弱い意味での近似解を採用することができる. 以下, 数値検証する空間は同じ $X = L^\infty(J; H_0^1(\Omega))$ だが, 不動点形式で現れる解析半群がすべて $H^{-1}(\Omega)$ 上の解析半群 $\{e^{-t\mathcal{A}}\}_{t \geq 0}$ に置き換わっている.

定理 2.2 (Theorem 2.7 in [9] の改良版). 放物型問題 (2) を考える. 初期関数 u_0 に対して, $\|u_0 - \tilde{u}(t_0)\|_{H_0^1} \leq \varepsilon_0$ が成り立つとし, 数値計算で得られた近似解 $\tilde{u}$ が

$$\left\| \int_{t_0}^t e^{-(t-s)\mathcal{A}} (\partial_s \tilde{u}(s) + \mathcal{A}\tilde{u}(s) - f(\tilde{u}(s))) ds \right\|_{L^\infty(J; H_0^1(\Omega))} \leq \delta$$

をみたすとする. さらに $y \in B_J(\tilde{u}, \rho)$ における $f : H_0^1(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$ の Frechét 微分に対して, ある非減少関数 $L : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ が存在し, 次をみたす.

$$\|f'[y]u\|_{L^\infty(J; L^2(\Omega))} \leq L(\rho)\|u\|_{L^\infty(J; H_0^1(\Omega))}, \quad \forall u \in L^\infty(J; H_0^1(\Omega)).$$

このとき, もし $\rho > 0$ が

$$\varepsilon_0 + \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda_{\min} e}} \operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{\lambda_{\min} \tau}{2}}\right) L(\rho)\rho + \delta < \rho$$

をみたすならば, (2) の mild solution が $B_J(\tilde{u}, \rho)$ 内に局所一意存在する. ただし, $\lambda_{\min}$ は $-\Delta$ に斉次 Dirichlet 境界条件を付与した際の最小固有値, $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-s^2} ds$, $\tau := t_1 - t_0$ をそれぞれ表すとする.

注意 2.3. その他, 重み付き Banach 空間での局所存在定理などが考えられる. 重みを導入することで少々評価が良くなることがあるが, 基本方針は全く同じである. さらに解析半群を用いると大域解の数値的存在検証が可能となる. 数値計算で得られた近似解の代わりに定常解を利用して, 定常解周りに時刻無限大で解が収束することを数値検証するものである. 詳しくは [10] を参照されたい.

3. 発展作用素を用いる精度保証付き数値計算法

本節では $J := (t_0, t_1] \subset \mathbb{R}$ ($0 \leq t_0 < t_1 < \infty$), $\Omega = (0, 1)^d \subset \mathbb{R}^d$ ($d = 1, 2, 3$) として次の非線形放物型方程式の初期値境界値問題を考える.

$$\begin{cases} \partial_t u - \Delta u = u^p & \text{in } J \times \Omega, \\ u(t, x) = 0, & t \in J, x \in \partial\Omega, \\ u(t_0, x) = u_0(x), & x \in \Omega. \end{cases} \quad (4)$$

本問題が (2) と異なる点は領域, 非線形項と初期関数を $u_0 \in L^2(\Omega)$ とした点である. そして指数 p が $1 < p < 1 + \frac{4}{d}$ をみたすと仮定する.

解析半群を用いる精度保証付き数値計算法 [9, 10] は誤差の精度が (近似解次第ではあるものの) 粗い. より精密に誤差評価を行う事を目標に, 簡易ニュートン写像を考える. 以降, 論文等では伝わりづらいであろう我々の感覚を説明するため数学的に粗い表現をするが, 勘所を伝えられたらと思う. まず, (4) の第一式を (1) のような作用素方程式 $F(u) := \partial_t u - \Delta u - u^p = 0$ として, その簡易ニュートン写像 $T(u) := u - AF(u)$ を考える. 作用素 A はこの段階ではまだ未決定である. 数値計算で得られた近似解を $\tilde{u}$ とすると, 我々の目的は $\tilde{u}$ 近傍での不動点定理の成立である. このとき

$$\begin{aligned} T(u) - \tilde{u} &= T(u) - T(\tilde{u}) + T(\tilde{u}) - \tilde{u} \\ &= u - AF(u) - (\tilde{u} - AF(\tilde{u})) - AF(\tilde{u}) \\ &= A(A^\dagger(u - \tilde{u}) - (F(u) - F(\tilde{u}))) - AF(\tilde{u}) \\ &= A(A^\dagger(u - \tilde{u}) - (\partial_t - \Delta)(u - \tilde{u}) + u^p - \tilde{u}^p) - AF(\tilde{u}) \end{aligned}$$

となる. 最後の式から, 天下りの的であるが, $A^\dagger = \partial_t - \Delta$ として作用素 A を $A^\dagger$ の解作用素, すなわち Δ から生成される解析半群 $\{e^{t\Delta}\}_{t \geq 0}$ とすると, A は $A^\dagger$ の右逆作用素となり $AA^\dagger = I$. 最後の式が 2 節で紹介した不動点形式 $S(z)$ に対応する⁵. 一方で, $A^\dagger = \partial_t - \Delta - p\tilde{u}^{p-1}$ とすると, 非線形項は $u - \tilde{u}$ のノルムの 2 乗のオーダーで評価でき, より精密に誤差評価ができることが見込まれる. この時の A は $A^\dagger$ が時間変数に依存することから発展作用素となる.

さて, 粗い議論はここまでにして, 発展作用素を用いる精度保証付き数値計算法を紹介する. はじめに正值作用素 $\Delta_\mu := -\Delta + \mu$ ($\mu > 0$) に対して Δ_μ の分数幕を

$$\Delta_\mu^\alpha \varphi := \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i^\alpha c_i \psi_i, \quad D(\Delta_\mu^\alpha) := \left\{ \varphi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \psi_i \in L^2(\Omega) : \sum_{i=1}^{\infty} c_i^2 \lambda_i^{2\alpha} < \infty \right\}, \quad 0 \leq \alpha \leq 1$$

で定義する. ここで ψ_i は $L^2(\Omega)$ 上の正規直交基底, $c_i = (\varphi, \psi_i)_{L^2}$, λ_i は各固有値. 数値検証する関数空間を $X = C(J; D(\Delta_\mu^\alpha))$ とする. そして $\sigma > 0$ を $\sigma - p\tilde{u} \geq \mu$ が成立するように選び, 作用素 $A(t)$ を $A(t) := -\Delta + (\sigma - p\tilde{u}(t))$ とする. $D(A(t)) \equiv D(\Delta)$ であり, $\varphi \in D(\Delta)$, $\phi \in H_0^1(\Omega)$ に対して,

$$|(A(t)\varphi, \phi)_{L^2}| \leq M \|\varphi\|_{H_0^1} \|\phi\|_{H_0^1}, \quad (A(t)\varphi, \varphi) \geq \|\varphi\|_{H_0^1}^2 (= \|\nabla \varphi\|_{L^2}^2 + \mu \|\varphi\|_{L^2}^2)$$

が成り立つから, 各 $t \in J$ で $A(t)$ は $L^2(\Omega)$ において解析半群を生成する [14, 22]. さらに近似解が時間変数に対して十分滑らかならば,

$$\|(A(t) - A(s))A(s)^{-1}\varphi\|_{L^2} \leq C|t - s|\|\varphi\|_{L^2}, \quad \forall \varphi \in L^2(\Omega), \quad t, s \in J,$$

をみたす $C > 0$ が存在し, $-A(t)$ は $L^2(\Omega)$ において発展作用素 $\{U(t, s)\}_{t_0 \leq s \leq t \leq t_1}$ を生成する [18, 21]⁶. この発展作用素を使って, 不動点形式

$$(S(v))(t) := U(t, t_0)v(t_0) + \int_{t_0}^t U(t, s)g(v(s))ds$$

⁵ $Af(t) = e^{t\Delta}u_0 + \int_0^t e^{(t-s)\Delta}f(s)ds$ となると考えている.

⁶ 1960 年代, 田辺と Sobolevskii はそれぞれ独立に $D(A(t))$ が時間変数 t に依存しない場合の発展作用素の生成条件を導いた. その後の発展は [14, 22] などが詳しい.

を定義する. ここで

$$g(v) := e^{-\sigma(t-t_0)} \left\{ (\tilde{u} + e^{\sigma(t-t_0)}v)^p - \tilde{u}^p - p\tilde{u}^{p-1}e^{\sigma(t-t_0)}v + \tilde{u}^p - \partial_t \tilde{u} + \Delta \tilde{u} \right\},$$

$v := e^{-\sigma(t-t_0)}(u - \tilde{u})$ とした. 作用素 S が不動点 $v(= S(v))$ をもつことと (4) の mild solution が存在することは同値となる. 検証には次の時間変数に対する重み付き関数空間を使う. $C(J; D(\Delta_\mu^\alpha))$ の部分空間を

$$X_\alpha := \left\{ u : \sup_{t \in J} (t - t_0)^\alpha \|\Delta_\mu^\alpha u\|_{L^2} < +\infty \right\}, \quad \|\cdot\|_{X_\alpha} := \sup_{t \in J} (t - t_0)^\alpha \|\Delta_\mu^\alpha \cdot\|_{L^2}$$

と定めると, ノルム $\|\cdot\|_{X_\alpha}$ において X_α は Banach 空間⁷となる. 以下の局所包含定理では分数冪 α を一つ固定し, (4) の mild solution を近似解の近傍

$$B_J(\tilde{u}, \rho) := \left\{ u : \sup_{t \in J} (t - t_0)^\alpha e^{-\sigma(t-t_0)} \|\Delta_\mu^\alpha(u - \tilde{u})\|_{L^2} \leq \rho \right\}$$

に包含する.

定理 3.1 (Theorem 3.1 in [20]). 放物型問題 (4) を考える. $\alpha \in (\frac{d(p-1)}{4p}, \frac{1}{p})$, 初期関数 u_0 に対して, $\|u_0 - \tilde{u}(t_0)\|_{L^2} \leq \varepsilon_0$ が成り立つとし, 数値計算で得られた近似解 $\tilde{u}$ が

$$\|\partial_t \tilde{u} - \Delta \tilde{u} - \tilde{u}^p\|_{C(J; L^2(\Omega))} \leq \delta$$

をみたすとする. このとき, もし $\rho > 0$ が

$$W(\tau) \left(\varepsilon_0 + L_{\tilde{u}}(\rho) \rho^2 + \frac{\delta \tau}{1 - \alpha} \right) < \rho$$

をみたすならば, (4) の mild solution が $B_J(\tilde{u}, \rho)$ の中に局所一意存在する. ただし,

$$W(\tau) := \left(\frac{\alpha}{e} \right)^\alpha \left\{ 1 + \frac{C_{\tilde{u}} \tau^2}{(1 - \alpha)(2 - \alpha)} \right\},$$

$$L_{\tilde{u}}(\rho) := p(p-1)C_{2p, \alpha}^2 e^{\sigma \tau} \left(\tau^\alpha \|\tilde{u}\|_{C(J; L^{2p}(\Omega))} + C_{2p, \alpha} e^{\sigma \tau} \rho \right)^{p-2} \tau^{1-p\alpha} B(1 - \alpha, 1 - p\alpha)$$

とする. 上記 $C_{\tilde{u}}$ は

$$\|A(t) - A(s)\| \leq C_{\tilde{u}}(t - s), \quad s \leq t, \quad s, t \in J$$

をみたす定数, $C_{2p, \alpha}$ は次をみたす埋め込み定数.

$$\|\phi\|_{L^{2p}} \leq C_{2p, \alpha} \|\Delta_\mu^\alpha \phi\|_{L^2}, \quad \forall \phi \in D(\Delta_\mu^\alpha).$$

$B(x, y)$ はベータ関数を表す.

注意 3.2. 発展作用素を用いる精度保証付き数値計算は解析半群を用いるのに比べて, 同じ近似解を使っても良い時で 1000 倍程度高精度に評価が可能となる. その反面, 評価の手間が増えることを注意しておく.

⁷関数空間 $C(J; D(\Delta_\mu^\alpha))$ のノルムは通常グラフノルム, しかし $D(\Delta_\mu^\alpha)$ から $L^2(\Omega)$ への埋め込みが存在するため上記ノルムはグラフノルムと同値.

4. 非線形熱方程式の複素時間における解の挙動

本節では、区間 $(0, 1) \subset \mathbb{R}$ 上に定義された次の藤田型方程式

$$\begin{cases} u_t = u_{xx} + u^2, & x \in (0, 1), t \geq 0, \\ u(0, x) = 50(1 - \cos(2\pi x)), & x \in (0, 1) \end{cases} \quad (5)$$

に周期境界条件を課した、初期値境界値問題を考える．方程式 (5) の解は有限時刻で爆発することが知られている．すなわち、ある $t_{\max} < \infty$ が存在して $\|u(t)\|_{L^\infty} (= \|u(t, \cdot)\|_{L^\infty}) \rightarrow \infty$ ($t \rightarrow t_{\max}$) が成り立つ．ここでは、(5) の時間変数を複素数に拡張し、 $\Re[t] \geq 0$ とした初期値境界値問題の解の挙動を精度保証付き数値計算で厳密に追跡する方法を考える．

この初期値境界値問題の先行研究として、増田 [6, 7] がある．増田は斉次 Neumann 境界条件を課した問題を考え、もしも初期関数が定数に近ければ、大域解が存在することを示した．さらにある複素領域において、解は解析関数となる．そして、もしも解軌道が二つの領域の共通部分で一致するとき、それぞれの初期関数は定数であることが示された．つまり、非定数関数を初期関数とする (5) の解は複素領域上に解析接続されるが $\Re[t] > t_{\max}$ となる実軸上で一価関数とはならない．

増田 [6, 7] に続いて、岡本ら [2] は周期境界条件下の解の挙動を数値計算で観察した．複素領域上の経路 $\Gamma_\gamma: t = \rho e^{i\gamma}$ ($\gamma \in (0, \pi/2)$) を考え、この経路上の方程式⁸

$$\frac{1}{e^{i\gamma}} u_\rho = u_{xx} + u^2, \quad x \in (0, 1), \rho \geq 0 \quad (6)$$

を有限差分近似により解の挙動を観察し、経路 Γ_γ 上では $|t| \rightarrow \infty$ において爆発せず零関数に収束していく数値結果を得た．すなわち増田 [6, 7] による時間大域解の存在は周期境界条件下でも成立することが示唆される．さらに $\gamma = \pi/2$ の場合は経路 $t = is$ を考える．これは非線形 Schrödinger 方程式

$$\frac{1}{i} u_s = u_{xx} + u^2, \quad x \in (0, 1), s \geq 0 \quad (7)$$

となり、非線形 Schrödinger 方程式の数値計算により解の挙動が観察された．そして時間大域存在とその減衰オーダー $O(s^{-1})$ を予想した．岡本ら [2] では、数値計算による解の観察のほかに爆発点を分岐点として解析した結果が述べられ、最後に次のような予想を提案している．

岡本ら [2] の予想

- 非線形熱方程式の解となる解析関数は分岐点をもつ．そして定数解でない限り、分岐特異性しかもたない．
- 非線形 Schrödinger 方程式 (7) は実初期関数に対して解が時間大域的に存在する．

本研究では (6) および (7) に対する解の精度保証付き数値計算法を構築することで、これらの予想を（部分的でも）解決することを目指す．注目すべきは解が解析関数となる点で、解の Fourier 係数に対応する点列空間上での精度保証付き数値計算を紹介する．

⁸ 複素 Ginzburg-Landau 方程式の特殊な場合である．

4.1. Fourier 係数に対する精度保証付き数値計算

経路 $\Gamma_\gamma : t = \rho e^{i\gamma}$ ($\gamma \in (0, \pi/2)$) 上の (5) の解, すなわち複素 Ginzburg-Landau 方程式 (6) に対する解の精度保証付き数値計算を考える. いま (6) の解を $u(x, \rho) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} a_k(\rho) e^{ik\omega x}$, $\omega = 2\pi$ と Fourier 級数展開すると (6) は関数列 $a(\rho) = (a_k(\rho))_{k \in \mathbb{Z}}$ に対する

$$\frac{d}{d\rho} a_k(\rho) = e^{i\gamma} \{ -k^2 \omega^2 a_k(\rho) + (a(\rho) * a(\rho))_k \}, \quad k \in \mathbb{Z}$$

という無限次元の常微分方程式系になる. ここで $b * c$ は点列 $b = (b_k)_{k \in \mathbb{Z}}$, $c = (c_k)_{k \in \mathbb{Z}}$ に対する Cauchy 積を表し, $(b * c)_k = \sum_{m \in \mathbb{Z}} b_{k-m} c_m$, $k \in \mathbb{Z}$ で定義される. ここで ρ を固定し, 点列 $a(\rho) = (a_k(\rho))_{k \in \mathbb{Z}}$ に対する作用素方程式

$$(F(a))(\rho) := \frac{d}{d\rho} a(\rho) + e^{i\gamma} \{ -D^2 a(\rho) - (a(\rho) * a(\rho)) \} = 0$$

を考える. ただし掛け算作用素 D^2 を $D^2 a := (-k^2 \omega^2 a_k)_{k \in \mathbb{Z}}$, $a = (a_k)_{k \in \mathbb{Z}}$ とした.

作用素方程式 $(F(a))(\rho) = 0$ の簡易ニュートン写像 $(T(a))(\rho) := a(\rho) - A(F(a))$ を考える. ここで, A は数値計算で得られた $\tilde{a}$ を使って定義される作用素 $B(\rho) := D^2 - 2(\tilde{a} * \cdot)$ が生成する発展作用素の近似とする⁹. この作用素 T を用いて $a = T(a)$ をみたす不動点が (ρ に対して一様に) 存在することを数値計算により検証できれば解の精度保証付き数値計算となる. 不動点の存在を検証する関数空間は以下の考察により決定する. 方程式 (6) の解は Cauchy-Kovalevskaya の定理より解析関数である. 従って, 点列空間 $\ell^1 := \{a = (a_k)_{k \in \mathbb{Z}} : \sum_{k \in \mathbb{Z}} |a_k| < \infty\}$ を考え, この点列を係数にもつ Fourier 級数が解析関数となる Paley-Weiner の結果を利用する. よって, 数値検証する Banach 空間 $X = C((0, \rho); \ell^1)$ のノルムのもとで近似解の近傍

$$B_{(0, \rho)}(\tilde{a}, \alpha) := \{a \in X : \|a - \tilde{a}\|_{C((0, \rho); \ell^1)} \leq \alpha\}$$

の任意の元 a に対して, $\|T(a) - \tilde{a}\|_X (\leq \|a - \tilde{a}\|_X) \leq \alpha$ が成立し, T の縮小性も成立すれば, Banach の不動点定理から $T(a) = a$ をみたす不動点が $B_{(0, \rho)}(\tilde{a}, \alpha)$ 内に存在することがいえる.

この精度保証付き数値計算の成功のために, Fourier-Chebyshev スペクトル法の数値解を用意する. いま (6) の解を x 変数に関して Fourier 級数で, ρ 変数に関して Chebyshev 級数でそれぞれ展開し, Fourier 基底数を $|k| \leq N$, Chebyshev 基底数を $l \leq n$ まで取ると, 近似解は

$$\tilde{u}(x, \rho) = \sum_{|k| \leq N} \tilde{a}_k(\rho) e^{ik\omega x} = \sum_{|k| \leq N} \left(\sum_{l=0}^n \tilde{a}_{k,l} T_l(\rho) \right) e^{ik\omega x}, \quad \tilde{a}_{k,l} \in \mathbb{C}$$

と表現できる. このような数値計算は最近 Chebfun[3] を用いると容易に実装可能である. これを関数列として考えるときは数値計算で得られた Fourier 係数 $\tilde{a}_k(\rho)$ の拡張 $\tilde{a}(\rho) := (\dots, 0, 0, \tilde{a}_{-N}(\rho), \dots, \tilde{a}_N(\rho), 0, 0, \dots)$ とする. 以上をまとめて数値検証のための局所存在定理は次のようになる.

⁹ 具体的には有限次元部分と無限次元部分で定義する.

定理 4.1. 複素 Ginzburg-Landau 方程式 (6) を考える. 点列 $a(0)$ に対して, $\|a(0) - \tilde{a}(0)\|_{\ell^1} \leq \varepsilon_0$ が成り立つとし, 近似解 $\tilde{a}$ と $a \in B_{(0,\rho)}(\tilde{a}, \alpha)$ に対して

$$\sum_{|k| \leq N} |(T(a) - \tilde{a})_k| \leq f_{\varepsilon_0}^{(N)}(\alpha^{(N)}, \alpha^{(\infty)}), \quad \sum_{|k| > N} |(T(a) - \tilde{a})_k| \leq f_{\varepsilon_0}^{(\infty)}(\alpha^{(N)}, \alpha^{(\infty)})$$

となる $\alpha^{(N)}, \alpha^{(\infty)}$ に関する高々 2 次の非線形関数 $f_{\varepsilon_0}^{(N)}, f_{\varepsilon_0}^{(\infty)}$ が存在し, もし

$$\begin{cases} f_{\varepsilon_0}^{(N)}(\alpha^{(N)}, \alpha^{(\infty)}) \leq \alpha^{(N)} \\ f_{\varepsilon_0}^{(\infty)}(\alpha^{(N)}, \alpha^{(\infty)}) \leq \alpha^{(\infty)} \end{cases}$$

をみたすならば, (6) の Fourier 係数 a が $B_{(0,\rho)}(\tilde{a}, \alpha^{(N)} + \alpha^{(\infty)})$ 内に一意存在する.

5. おわりに

本稿では時間発展する偏微分方程式に対する解の精度保証付き数値計算を半群理論 (解析半群, 発展作用素) を利用して実現する方法について紹介した. 半群理論は解析分野では広く知られており, これを計算機援用手法と組み合わせることで新たな精度保証付き数値計算のアプローチを提案できた. 特に, 4 節で紹介したスペクトル法の性質を利用する精度保証付き数値計算法は領域が限定されてしまう弱点を許容すれば, より多くの偏微分方程式に適用可能である. 一例として典型的な双曲型偏微分方程式である $\Omega = (0, 2\pi) \in \mathbb{R}$ 上の周期境界条件下の変数係数移流方程式

$$u_t + c(x)u_x = 0, x \in \Omega, t > 0$$

を考え, この解の精度保証付き数値計算を ℓ^1 上で生成される C_0 -半群を利用することで実現できることが分かっている. より一般的には点列空間 ℓ^1 上で C_0 -半群を構成できるかは必ずしも自明でなく, 生成作用素に関する確認が複雑になる可能性がある. そして双曲型偏微分方程式は数値計算自体も難しく, これを精度保証付き数値計算する理論の構築は次なる課題である.

謝辞

共同研究者である水口信, 久保隆徹, 大石進一, 岡本久各氏に深く感謝申し上げます.

参考文献

- [1] 実例で学ぶ精度保証付き数値計算: 理論と実装. SGC ライブラリ. サイエンス社, 2011.
- [2] C.-H. Cho, H. Okamoto, and M. Shōji. A blow-up problem for a nonlinear heat equation in the complex plane of time. *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, 33(1):145–166, Feb. 2016.
- [3] T. A. Driscoll, N. Hale, and L. N. Trefethen. *Chebfun Guide*. Pafnuty Publications, 2014.
- [4] J.-L. Figueras, M. Gameiro, J.-P. Lessard, and R. de la Llave. A framework for the numerical computation and a posteriori verification of invariant objects of evolution equations. *SIAM Journal on Applied Dynamical Systems*, 16(2):1070–1088, 2017.
- [5] T. Kinoshita, T. Kimura, and M. T. Nakao. On the a posteriori estimates for inverse operators of linear parabolic equations with applications to the numerical enclosure of solutions for nonlinear problems. *Numerische Mathematik*, 126(4):679–701, 2014.

- [6] K. Masuda. Blow-up of solutions of some nonlinear diffusion equations. In H. Fujita, P. D. Lax, and G. Strang, editors, *Nonlinear Partial Differential Equations in Applied Science; Proceedings of The U.S.-Japan Seminar, Tokyo, 1982*, volume 81 of *North-Holland Mathematics Studies*, pages 119–131. North-Holland, 1983.
- [7] K. Masuda. Analytic solutions of some nonlinear diffusion equations. *Mathematische Zeitschrift*, 187(1):61–73, Mar. 1984.
- [8] T. Minamoto. Numerical existence and uniqueness proof for solutions of semilinear parabolic equations. *Applied Mathematics Letters*, 14(6):707–714, 2001.
- [9] M. Mizuguchi, A. Takayasu, T. Kubo, and S. Oishi. A method of verified computations for solutions to semilinear parabolic equations using semigroup theory. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 55(2):980–1001, 2017.
- [10] M. Mizuguchi, A. Takayasu, T. Kubo, and S. Oishi. Numerical verification for existence of a global-in-time solution to semilinear parabolic equations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 315:1–16, 2017.
- [11] M. T. Nakao. A numerical approach to the proof of existence of solutions for elliptic problems. *Japan Journal of Applied Mathematics*, 5(2):313, Jun. 1988.
- [12] M. T. Nakao, T. Kinoshita, and T. Kimura. On a posteriori estimates of inverse operators for linear parabolic initial-boundary value problems. *Computing*, 94(2):151–162, 2012.
- [13] M. T. Nakao, T. Kinoshita, and T. Kimura. Constructive a priori error estimates for a full discrete approximation of the heat equation. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 51(3):1525–1541, 2013.
- [14] A. Pazy. *Semigroups of Linear Operators and Applications to Partial Differential Equations*. Springer-Verlag New York, 1983.
- [15] M. Plum. Computer-assisted existence proofs for two-point boundary value problems. *Computing*, 46(1):19–34, Mar. 1991.
- [16] M. Plum. Existence and multiplicity proofs for semilinear elliptic boundary value problems by computer assistance,. *Jahresber. Deutsch. Math.-Verein.*, 110:19–54, 2008.
- [17] P. Quittner and P. Souplet. *Superlinear Parabolic Problems: Blow-up, Global Existence and Steady States*. Birkhäuser Advanced Texts Basler Lehrbücher. Birkhäuser, Basel, 2007.
- [18] P. E. Sobolevskii. On equations of parabolic type in Banach space with unbounded variable operator having a constant domain (in Russian). *Akad. Nauk Azerbaidzan. SSR Doki*, 17(6), 1961.
- [19] A. Takayasu, X. Liu, and S. Oishi. Verified computations to semilinear elliptic boundary value problems on arbitrary polygonal domains. *Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE*, 4(1):34–61, 2013.
- [20] A. Takayasu, M. Mizuguchi, T. Kubo, and S. Oishi. Accurate method of verified computing for solutions of semilinear heat equations. *Reliable computing*, 25:74–99, 2017.
- [21] H. Tanabe. On the equations of evolution in a Banach space. *Osaka Mathematical Journal*, 12(2):363–376, 1960.
- [22] A. Yagi. *Abstract Parabolic Evolution Equations and their Applications*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2010.
- [23] N. Yamamoto. A numerical verification method for solutions of boundary value problems with local uniqueness by Banach’s fixed-point theorem. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 35(5):2004–2013, 1998.
- [24] P. Zgliczynski and K. Mischaikow. Rigorous Numerics for Partial Differential Equations: The Kuramoto—Sivashinsky Equation. *Foundations of Computational Mathematics*, 1(3):255–288, Jul. 2001.