《講　座》

精度保証付きシミュレーション［4］
―偏微分方程式の精度保証―

渡部善隆*・中尾充宏**

ABSTRACT　Some validated computations of the solution for partial differential equations are described. These methods are based on infinite dimensional fixed-point theorems using Newton-like operators. Interval arithmetic is used in order to take account of the effects of rounding errors in the floating point computations and check sufficient conditions for fixed-point theorems rigorously.

1. はじめに

偏微分方程式は，各種の現象を記述する数学モデルとして自然科学・工学・社会科学・人文科学のさまざまな分野に登場します．与えられた偏微分方程式について知りたいことは，

- 解は存在するのか？
- どんな形をしているか？

です．解が存在しないならば数学モデルを立てたもともとの意味がなくなります．また，ある条件における具体的な値が決定できないと困ることも多いはずです．

偏微分方程式が数学の言葉で表現されている以上，解析的な厳密解を具体的な関数の形で「ズバリ」と書き表せることが理想です．しかし残念なことに，そのような統一的理論は現在のところ提示されていません．また，解析的な解の存在や一意性はわかっていたとしても，具体的な解の形状を描くことができないということもあります．

数値シミュレーションの多くは，偏微分方程式の解を解析的に追求することはひとまずあきらめ，差分法・有限要素法・境界要素法などの離散化手法を用いて問題を有限次元化し，得られた近似モデルを計算機を用いて数値的に解くことによって数値データを得て，さらに可視化することまでを当面の目標とします．

数値シミュレーションの次の課題は，計算機の出力する数値データの「正当性」を明らかにすることです．その際，実験データとの照合による現象との比較のほかに，数学モデルの厳密解との比較（誤差評価）ができるならば，計算結果の信頼性が格段に増します．誤差評価とは，近似解 $\hat{u}$ と厳密解 u と計算可能なノルム $\|\ \|$ に対して，

$$\|\hat{u}-u\|\leq\varepsilon \tag{1}$$

となる $\varepsilon>0$ を見つけることだといえます．ε は，たとえば領域の分割を細かくするなど離散化の度合を増したときに，それにあわせて小さくなることが期待される数です．しかしながら，厳密解の場合と同じように，理論的な ε の存在および離散化の度合との関係（オーダーなど）はわかったとしても，具体的な ε の値はなかなか定まりません．経験的に ε がとんでもなく大きな値でないことは予測できるとしても，もしも ε の取り得る値が定量的に評価できるならば，安心感とともに計算結果の信頼性がさらに増すことでしょう．

本稿で説明する**偏微分方程式の精度保証付き数値シミュレーション**とは，計算機を用いて

- 近似解の近くに数学モデルの厳密解が存在することを保証し，
- (1)の ε の値を具体的に与える

手法です．もちろん，すべての偏微分方程式に対して精度保証付きシミュレーションが適用できるかどうかはわかりません．しかし，もしうまく適用できるならば，理論面では厳密解の存在や問題によっては一意性の数学的な保証を，実用面では誤差の具体的な把握と

Simulation with Guaranteed Accuracy [IV]—Verified Numerical Computation for Partial Differential Equations—. By *Yoshitaka Watanabe* (Computing and Communications Center, Kyushu University) and *Mitsuhiro T. Nakao* (Guraduate School of Mathematics, Kyushu University).

*九州大学情報基盤センター
**九州大学大学院数理学研究院

ともに離散化手法・計算アルゴリズム・反復の打ち切り・丸め誤差の混入などを含んだ数値シミュレーション全体の品質保証を与えることができると考えられます．微分方程式の解は無限個の基底で張られる世界に属し，計算機が出力する数値データは有限次元のベクトル空間に属します．精度保証付きシミュレーションは，数値データと数学モデルとの関係を計算機を用いて調べることによって，有限と無限を結ぼうとする数値解析学の一手法だといえます．

2. 偏微分方程式の解の精度保証に関する基本的な考え方

2.1 不動点定理

偏微分方程式の解の精度保証で主役を演じるのは，**不動点定理**です．数々ある不動点定理の本質をやや乱暴に表現すると，次のようになります．

不動点定理のエッセンス

ある条件を満たす写像 F と集合 U に対し

$F(U)\subset U$

もしくは類似の条件が成立するならば，$F(U)$ の中に不動点方程式 $u=F(u)$ の解が存在する．ただし，$F(U)$ は集合の意味で

$F(U):=\{F(u)\,|\,u\in U\}$.

偏微分方程式の精度保証付き数値シミュレーションの流れは次のようになります．

1. 不動点定理を決める．
2. 近似解を計算する．
3. 近似解も考慮に入れた不動点方程式 $u=F(u)$ を構成する．
4. 解を包含することが期待される集合（候補者集合）U を設定する．
5. 不動点定理の成立条件 $F(U)\subset U$ を検証する．
6. 検証がうまくいかない場合には候補者集合 U を再設定して前段に戻る．

それぞれの段階において，どのような関数空間を設定するか，$F(U)$ となるべき写像 F と集合 U をどのように構成するか，離散化誤差や丸め誤差をどう取り扱うかなど，検討すべき問題がいろいろあります．

2.2 よく用いられる不動点定理の紹介

次の Schauder の不動点定理[6,15,19,25]は，有限次元ユークリッド空間における Brouwer の不動点定理[6]の無限次元への拡張です．

Schauder の不動点定理

M を Banach 空間 X の空でない有界凸閉集合，T を M 上のコンパクト作用素とする，このとき，T は不動点を持つ．

Banach 空間とは，Cauchy 列が必ず収束極限を持つ（完備といいます）ノルム空間のことです．ノルム空間 X, Y に対して作用素 $T:X\to Y$ がコンパクトであるとは，T が連続写像であり，かつ，X の任意の有界集合を T によって写したものが Y での収束列を含むことをいいます．

次の Banach の不動点定理[6,15,19,25]は，有限次元ユークリッド空間における縮小写像の原理[17]の無限次元版です．

Banach の不動点定理

M を Banach 空間 X の空でない閉集合，X のノルムを $\|\cdot\|_X$ とする．T を M 上の作用素とし，ある $0\le\lambda<1$ に対して次の性質をみたすとする．

$\|T(x)-T(y)\|_X\le\lambda\|x-y\|_X,\quad \forall x,y\in M.$

このとき，T は M の中に唯一の不動点を持つ．

その他，不動点定理以外でよく使われる解の存在定理として，有限次元の Newton 法の収束条件を与える Kantorovich の定理（Newton-Kantorovich の定理とも呼ばれます）[17]の無限次元版[25]があります．

3. 関数空間の設定と不動点定式化

以下，**非線形楕円型境界値問題**を具体的な例として取り上げ，解の精度保証の手順を説明します．偏微分方程式を数学的に取り扱うためには，まず，適切な関数空間を設定することが必要です．

3.1 関数空間の設定

領域 Ω を $R^n(n=2,3)$ の有界凸領域で，境界 $\partial\Omega$ は区分的に滑らかだとします．$L^2(\Omega)$ を Ω 上2乗可積分関数全体の集合，内積を $(u,v):=\int_\Omega u(x)v(x)dx$，ノルムを $\|u\|_{L^2(\Omega)}:=\sqrt{(u,u)}$ とします．次に，自然数 m に対する Ω 上の L^2-Sobolev 空間 $H^m(\Omega)$ を，超関数の意味での m 次以下の導関数（一般化された導関数）がすべて $L^2(\Omega)$ に属する関数全体の集合として定義します．このとき，$H^m(\Omega)$ は内積

$$\sum_{|k|=0}^{m}(D^{(k)}u,D^{(k)}v)$$

のもとで Hilbert 空間，すなわちこの内積によるノルムのもとで Banach 空間になります．ただし，$D^{(k)}$ は多重指標：$k=\{k_1,\cdots,k_n\}$ ($k_1,\cdots,k_n$ は非負整数）に対する微分：

$D^{(k)}:=\partial^{|k|}/\partial x_1^{k_1}\cdots\partial x_n^{k_n},\ |k|=k_1+\cdots+k_n$

です．さらに，

$$H_0^1(\Omega):=\{u\in H^1(\Omega)\mid u=0,\ x\in\partial\Omega\}$$

とします．ただし，$\partial\Omega$ 上での値はトレースの意味[18]です．このとき

$$\nabla u:=(\partial u/\partial x_1,\cdots,\partial u/\partial x_n)^T$$

に対し，$(\nabla u,\nabla v)$ は $H_0^1(\Omega)$ の内積になります．また，Poincaré の不等式より，

$$\|u\|_{H_0^1(\Omega)}:=\|\nabla u\|_{L^2(\Omega)}=\left(\sum_{i=1}^{n}\|\partial u/\partial x_i\|_{L^2(\Omega)}^2\right)^{1/2}$$

は Ω 上 H^1 ノルムと同値な H_0^1 ノルムとなることがわかります[3,4]．

3.2 不動点定式化

次の非線形楕円型境界値問題を考えます．

$$\begin{cases}-\Delta u=f(x,u,\nabla u), & x\in\Omega,\\ u\quad =0, & x\in\partial\Omega.\end{cases}\tag{2}$$

ここで，$\Delta u=\partial^2u/\partial x_1^2+\cdots+\partial^2u/\partial x_n^2$ とします．f は次の仮定を満たすとします．

1. f は $H^1(\Omega)$ から $L^2(\Omega)$ への連続写像，すなわち，関数列 $\{\varphi_k\}_{k\geq1}\subset H_0^1(\Omega)$ が H_0^1 ノルムの意味で $\varphi\subset H_0^1(\Omega)$ に収束するとき，$\{f(\varphi_k)\}_{k\geq1}\subset L^2(\Omega)$ は L^2 ノルムの意味で $f(\varphi)\in L^2(\Omega)$ に収束する．
2. 有界集合 $U\subset H^1(\Omega)$ に対し，
$$f(\cdot,U,\nabla U):=\{f(\cdot,u,\nabla u)\mid u\in U\}\subset L^2(\Omega)$$
も有界．

まず，有限要素法でよく知られた弱形式化手法を用いて，(2)を次を満たす弱解 $u\in H_0^1(\Omega)$ を探す問題に書き直します．

$$(\nabla u,\nabla v)=(f(x,u,\nabla u),v),\quad \forall v\in H_0^1(\Omega).\tag{3}$$

次に，(2)の線形化問題である Poisson 方程式に対する補題[2,5,9]を紹介します．

補題3.1

任意の $g\in L^2(\Omega)$ に対し，

$$\begin{cases}-\Delta\phi=g, & x\in\Omega,\\ \quad\phi=0, & x\in\partial\Omega,\end{cases}\tag{4}$$

は唯一の解 $\phi\in H^2(\Omega)\cap H_0^1(\Omega)$ を持ち，

$$|\phi|_{H^2(\Omega)}\leq\|g\|_{L^2(\Omega)}\tag{5}$$

が成立する．

ただし，$|\cdot|_{H^2(\Omega)}$ は $H^2(\Omega)$ 上のセミノルム：

$$|v|_{H^2(\Omega)}^2=\sum_{i,j=1}^{n}\|\partial^2v/\partial x_i\partial x_j\|_{L^2(\Omega)}^2$$

とします．$L^2(\Omega)$ の元 g から(4)の解 $\phi\in H_0^1(\Omega)\cap H^2(\Omega)$ の対応関係を $\phi=Ag$ と定義すると，A は $L^2(\Omega)$ から $H^2(\Omega)\cap H_0^1(\Omega)$ への全単射写像になります．次に，$H^2(\Omega)$ から $H^1(\Omega)$ への恒等写像を $\hat{I}$ とおくと，$\hat{I}$ はコンパクト作用素であることが示せます[1,18]．したがって f の仮定より，コンパクトな合成写像：

$$F:=\hat{I}Af\colon H_0^1(\Omega)\longrightarrow H_0^1(\Omega)\tag{6}$$

を定義することができ，(3)は $H_0^1(\Omega)$ 内の不動点方程式：

$$u=F(\cdot,u,\nabla u)$$

と同値になります．以降，簡単のため，

$$f(u):=f(\cdot,u,\nabla u),\quad F(u):=F(\cdot,u,\nabla u)$$

と表記します．不動点方程式の対応は以下の通りです．

$$\begin{array}{ccccccc}H_0^1(\Omega)&\xrightarrow{f}&L^2(\Omega)&\xrightarrow{A}&H^2(\Omega)\cap H_0^1(\Omega)&\xhookrightarrow{\hat{I}}&H_0^1(\Omega)\\ u&\longmapsto&f(u)&\longmapsto&Af(u)&\longmapsto&F(u)\end{array}$$

4. Newton 法と不動点定理の適用

不動点定理の成立条件となる "$F(U)\subset U$" は，写像 F が不動点の近傍で縮小的（引き込み的）であることを示しています．したがって，(6)で定義した F が縮小的な性格を持たない限り，どんな候補者集合 U をもってきても検証は成功しません．

そこで，有限次元非線形方程式の有力な解法のひとつである Newton 法（Newton-Raphson 法とも呼ばれます）に基づく手法を不動点方程式に適用することを考えます．

まず，$u=F(u)$ を直接 Newton 型方程式に書き直すことを考えます．$u=F(u)$ を求める問題は $u-F(u)=0$ を求める問題と同じです．よって，有限次元の Newton 法をそのまま拡張してあてはめると，ある初期値 $u^{(0)}$ から出発した反復列は

$$u^{(k)}=u^{(k-1)}-(I-F'(u^{(k-1)}))^{-1}(u^{(k-1)}-F(u^{(k-1)}))$$

となります．ここで $F'(u^{(k-1)})$ は F の $u^{(k-1)}$ における Fréchet 微分，I は $H_0^1(\Omega)$ 上の恒等写像です．この反復列を考える場合，$I-F'(u^{(k-1)})$ の逆写像の存在を各反復の度に示す必要があります．それは大変ですので，もし何らかの方法で見つけた $u=F(u)$ の近似解 $\bar{u}\in H_0^1(\Omega)$ が真の解にかなり近いならば，$F'(u^{(k-1)})$ を $F'(\bar{u})$ に置き換えても微分はそれほど変わらないだろうという期待のもと，反復列を

$$u^{(k)}=u^{(k-1)}-(I-F'(\bar{u}))^{-1}(u^{(k-1)}-F(u^{(k-1)}))$$

に変更します．$\bar{u}$ における Fréchet 微分に固定されているこの方法は「準 Newton 法」と呼ばれることがあ

ります．このようにすると，逆写像の存在を調べる手間は1回で済みます．準 Newton 反復列を生成する右辺の対応を

$$N(u):=u-(I-F'(\bar{u}))^{-1}(u-F(u))$$

と書くと，Nは$H_0^1(\Omega)$ 上の写像となります．ドイツの Plum の手法[9,16]は，（さらにこの形から残差形に変形した技法や近似解・空間に対する滑らかさなどの仮定を付け加えるものの，本質は）逆作用素 $(I-F'(\bar{u}))^{-1}$ のノルム評価を無限次元固有値問題に帰着させ，固有値を精度保証付きで評価することにより $N(U)\subset U$ となる候補者集合 Uを計算機内で構成しようとするものです．

4.1 近似空間と疑似 Newton 法

前節で作成した準 Newton 作用素Nは，有限次元の Newton 法を無限次元にそのまま拡張したものでした．今度は，不動点方程式（6）を近似空間内の不動点方程式とその誤差空間にあたる空間の不動点方程式に分解して，有限次元部分を Newton 型方程式に書き直そうという作戦をたてます．

$H_0^1(\Omega)$ の近似空間として，パラメータ $h>0$ に依存する有限次元部分空間 S_h を用意します．hは，たとえば S_h が有限要素空間の場合には分割したメッシュサイズの逆数，固有値展開などで近似した空間の場合には展開項数の逆数に対応します．次に，$H_0^1(\Omega)$ から S_h への射影として，$\phi\in H_0^1(\Omega)$ に対する H_0^1 内積の意味での直交射影（H_0^1-projection）$P_h\phi\in S_h$ を次のように定義します．

$$(\nabla(\phi-P_h\phi),\nabla v)=0,\quad \forall v\in S_h. \qquad (7)$$

S_hは$H_0^1(\Omega)$ の閉部分空間のため，$H_0^1(\Omega)$ の任意の元は S_h の元と直交補空間 $S_h^\perp$ の元で一意に書き表すことができます[3]．よって，$H_0^1(\Omega)$ の不動点方程式 $u=F(u)$ も P_h を用いて次のように S_h の部分と $S_h^\perp$ の部分に（一意に）分解することができます．

$$\begin{cases} P_hu &= P_hF(u), \\ (I-P_h)u &= (I-P_h)F(u). \end{cases} \qquad (8)$$

（8）の第1式は H_0^1-projection を介しているため，S_h における有限次元の問題です．第2式は無限次元の不動点方程式ではあるものの，S_h の近似度がよければ縮小写像的な働きをすることが期待されます[9]．よって，分解された不動点問題の S_h 部分に対し Newton 法を適用します．先ほどと同様に準 Newton 写像を形式的に考えれば，

$$P_hu-(I-P_hF'(\bar{u}))^{-1}P_h(u-F(u))$$

です．しかしこの場合，$I-P_hF'(\bar{u})$ の定義域が広すぎるため，逆写像の対応がつきません．そのため，$I-P_hF'(\bar{u})$ の定義域を S_h に制限した逆写像を $[I-P_hF'(\bar{u})]_h^{-1}$ と書き，代用することにします．この手法を準 Newton 法からさらに変形を加えたため「疑似 Newton 法」と呼ぶこともあります．

S_h 上の写像 $[I-P_hF'(\bar{u})]_h$ の逆写像が存在するかどうかは明らかではありません．しかし，有限次元の線形写像は行列で表現できるという線形代数の基本的な事実を用いると，逆写像の存在は対応する行列が正則であるかどうかという問題に帰着されます．実際の数値計算では，計算機内に対応する行列を構成して，その正則性を精度保証付きで調べます．

$$N_h(u):=P_hu-[I-P_hF'(\bar{u})]_h^{-1}P_h(u-F(u))$$

とおき，逆写像の存在 $[I-P_hF'(\bar{u})]_h^{-1}$ を仮定すれば，S_h 内における不動点方程式 $P_hu=P_hF(u)$ と $P_hu=N_h(u)$ は同値になります．以上より，縮小的であることが期待される $H_0^1(\Omega)$ 上の作用素 Tを

$$T(u):=N_h(u)+(I-P_h)F(u) \qquad (9)$$

で定義すると，以下の命題が成立します[9]．

補題4.1

Tは $H_0^1(\Omega)$ 上のコンパクト作用素，かつ，不動点方程式 $u=T(u)$ は $u=F(u)$ すなわち（3）と同値．

4.2 不動点定理の適用

（9）で定義した作用素 Tに対して候補者集合 Uを構成し，不動点定理を適用します．ここでは Schauder の不動点定理を採用します（Banach の不動点定理に基づく定式化も可能です[24]）．S_h の次元をK，基底を$\{\psi_i\}_{1\le i\le K}$とします．候補者集合 Uは，

$$U_h:=\left\{\sum_{i=1}^{K}A_i\psi_i\in S_h \middle| A_i:\boldsymbol{R}\text{ の区間}\right\},$$

$$U^\perp:=\{u^\perp\in S_h^\perp \mid \|u^\perp\|_{H_0^1(\Omega)}\le\alpha\}$$

の和集合 $U=U_h+U^\perp$ で構成します．U_hは区間係数の一次結合で表現される S_h の部分集合，$U^\perp$は，$H_0^1(\Omega)$ のノルムで“つぶされ”た半径 $\alpha>0$ の小さな球だと考えることができます．この時，次の検証条件が成り立ちます[9]．

定理4.2

$H_0^1(\Omega)$ の有界凸閉集合 $U=U_h+U^\perp$ に対し，

$$\begin{cases} P_hT(U) &\subset U_h, \\ (I-P_h)F(U) &\subset U^\perp \end{cases} \qquad (10)$$

が成り立つならば，Tの不動点すなわち（3）の解が U内に存在する．

（10）の第一式は，無限次元の項が含まれるため正確

には計算できません．しかし，ノルム評価などを用いて大きめに評価することは可能です．$P_hT(U)$ の計算は，通常，区間係数ベクトルを右辺に持つ連立1次方程式を精度保証付きで求める問題に帰着されます．無限次元部分の計算は，次章の構成的誤差評価を利用します．

5. 有限要素近似とその構成的誤差評価

候補者集合 $U \subset H_0^1(\Omega)$ に対して不動点定理の成立条件となる(10)を確認するためには，無限次元部分の $(I-P_h)F(U) \subset U^\perp$ の検証が必要になります．$U^\perp$ は $H_0^1(\Omega)$ のノルムの意味での半径 α の球です．したがって，$(I-P_h)F(U)$ も同じ $H_0^1(\Omega)$ のノルムで評価し，その値が α より小さいことを，つまり

$$\sup_{u \in U} \|(I-P_h)F(u)\|_{H_0^1(\Omega)} \leq \alpha$$

を確認すれば包含関係を示すことができます．この部分の計算に，(2)の線形化問題である Piosson 方程式(4)に対する近似とその構成的誤差評価が大きく関わってきます．以下，具体的な有限要素部分空間[4,18]を例として取り上げて説明します．

5.1 2次元矩形領域における四角形要素

簡単のため，領域 Ω を $(0,1)\times(0,1)$ の2次元矩形領域とします．区間 $J:=(0,1)$ の x 方向を

$$0=x_0<x_1<\cdots<x_{L+1}=1$$

と等分割し，$h=1/(L+1)$ とおきます．y 方向も同様に等分割します．次に，x 方向，y 方向について $(0,1)$ 上連続かつ両端で0となるような区分的1次多項式全体の集合をそれぞれ $\mathcal{M}_0^1(x)$, $\mathcal{M}_0^1(y)$ と書きます．近似空間となる有限要素空間 S_h は $\mathcal{M}_0^1(x)\otimes\mathcal{M}_0^1(y)$，すなわち $\mathcal{M}_0^1(x)$ と $\mathcal{M}_0^1(y)$ のすべての関数の積全体（テンソル積）として定義します．

次に，区間 J に対し，ある固定した $y\in J$ での1次元の射影 $P_x: H_0^1(\Omega)\cap H^2(\Omega)\to\mathcal{M}_0^1(x)$ を

$$(\partial(v(\cdot,y)-P_xv(\cdot,y))/\partial x, w')_J=0, \quad w\in\mathcal{M}_0^1(x)$$

で定義します．ただし $(\cdot,\cdot)_J$ は $L^2(J)$ 上の内積です．このとき，区分1次補間多項式に関する誤差評価から以下を得ます[9]．

$$\|\partial(v-P_xv)/\partial x\|_{L^2(\Omega)} \leq (1/\pi)h\|\partial^2 v/\partial x^2\|_{L^2(\Omega)}.$$

同様に y 微分についての評価式も得られます．この2つを組み合わせると，次の評価式を得ます．

補題5.1
先に定義した有限要素近似空間 S_h のもと，任意の $v\in H_0^1(\Omega)H^2(\Omega)$ に対し，

$$\|v-P_hv\|_{H_0^1(\Omega)} \leq (1/\pi)h|v|_{H^2(\Omega)} \qquad (11)$$

が成立する．

定数 $1/\pi$ は，J 上で定義した基底を区分的双2次多項式にした場合，$1/(2\pi)$ にできることがわかっています[12]．また，L字形の領域についても拡張することができます[23]．

5.2 三角形要素

三角形要素の場合には，矩形を含む2次元多角形領域で考えることができます．Ω を三角形分割し，各分割領域上で1次多項式となる有限要素空間 S_h を考えます．このとき，矩形と類似の補間誤差評価により以下の不等式が成立します[9]．

補題5.2
S_h の分割が一様の場合，任意の $v\in H_0^1(\Omega)\cap H^2(\Omega)$ に対し，

$$\|v-P_hv\|_{H_0^1(\Omega)} \leq 0.81h|v|_{H^2(\Omega)} \qquad (12)$$

が成立．

非一様分割の場合にも具体的な値を算定することができます．ただし，(12)の定数0.81は最適な値ではありません．数値実験による近似計算の結果ではもっと小さい値となるだろうということが報告されています．(12)のようなノルム評価は，無限次元固有値問題の固有値を評価する問題に帰着することが知られており，理論的なアプローチとともに，精度保証の観点からの研究成果が期待されます．

5.3 構成的誤差評価

(11), (12)をまとめて

$$\|v-P_hv\|_{H_0^1(\Omega)} \leq Ch|v|_{H^2(\Omega)} \qquad (13)$$

と書きます．$C>0$ は有限要素空間の近似性から定まる定数で，具体的な上界値が算定可能であるとします．任意の $v\in H_0^1(\Omega)\cap H^2(\Omega)$ に対して，3.2節で定義した写像 A を介して $L^2(\Omega)$ の元が決まり，(5)を満たします．したがって，任意の $u\in H_0^1(\Omega)$ に対し，以下の評価が成立します．

$$\begin{aligned}\|(I-P_h)F(u)\|_{H_0^1(\Omega)} &= \|(I-P_h)\tilde{I}Af(u)\|_{H_0^1(\Omega)} \\ &\leq Ch|Af(u)|_{H^2(\Omega)} \\ &\leq Ch\|f(u)\|_{L^2(\Omega)}.\end{aligned}$$

よって，検証条件(10)の無限次元部分の計算方法が以下のように得られます．

定理5.3
$U\subset H_0^1(\Omega)$ に対して，

$$\sup_{u\in U}\|(I-P_h)F(u)\|_{H_0^1(\Omega)} \leq Ch\sup_{u\in U}\|f(u)\|_{L^2(\Omega)} \qquad (14)$$

が成立．

$\|f(u)\|_{L^2(\Omega)}$ は無限次元の項を含むため，正確な値を計算することはできません．しかし，区間演算とノルム評価を用いることで大きめに値を算定することは可能です．

(14)は $O(h)$ の評価です．この評価によく知られた Aubin-Nitsche の技法[18]を適用することで，$O(h^2)$ となる構成的 L^2 誤差評価：

$$\sup_{u\in U}\|(I-P_h)F(u)\|_{L^2(\Omega)}\leq(Ch)^2\sup_{u\in U}\|f(u)\|_{L^2(\Omega)}$$

を得ることができます．さらに，埋め込み $H^2(\Omega)\hookrightarrow L^\infty(\Omega)$ に関わる定数を理論的に評価することによって，構成的 L^∞ 誤差評価も可能です[10,11]．

6. 非線形偏微分方程式への適用例

6.1 Allen-Cahn 方程式

5.1節で設定した領域，有限要素空間における適用例として，生物数学モデルとして知られている Allen-Cahn 方程式：

$$\begin{cases} -\Delta u=\lambda u(u-a)(1-u), & x\in\Omega,\\ u\quad =0, & x\in\partial\Omega. \end{cases}$$

を取り上げます[20]．この方程式は $0<a<1/2$ のとき，ある $\lambda^*>0$ で自明解 $u=0$ 以外の分岐解が生じることが知られています．しかし，理論的に言えるのはここまでで，具体的な解の形状や存在範囲は不明です．

$\lambda=150$，$a=0.01$，$L=79$において上側分岐解，下側分岐解それぞれの検証に成功した例を紹介します．上側で $\alpha=0.0622$，下側で $\alpha=0.01066$です．図1，図2は$y=1/2$ での断面です．解は2つの線で囲まれた領域に α 分の H_0^1 ノルムを付け加えた集合に存在します．

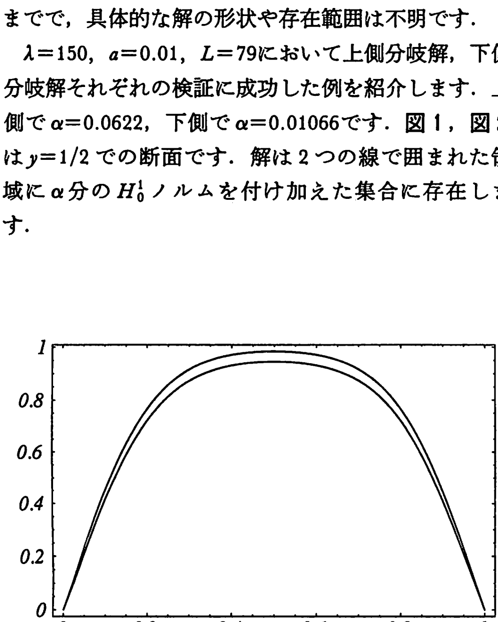

図1 上側分岐解の包み込み（$y=1/2$）

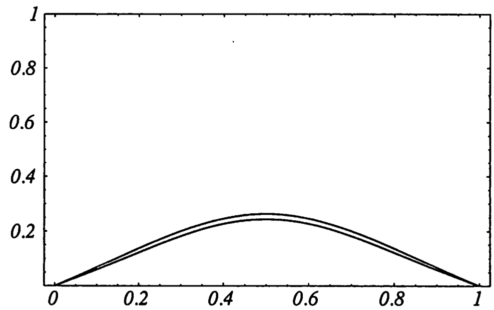

図2 下側分岐解の包み込み（$y=1/2$）

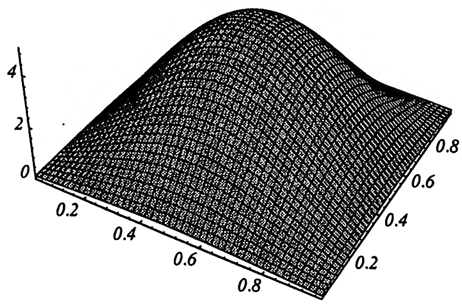

図3 近似解の形状

6.2 MHD 均衡問題

同じく5.1節で設定した領域，有限要素空間において，MHD 均衡問題に関係する方程式：

$$\begin{cases} -\Delta v=\lambda\max\{v,0\}, & x\in\Omega,\\ v\quad =-1, & x\in\partial\Omega. \end{cases}$$

の自明な解 $v=-1$ 以外を見つけることを考えます[21]．$u:=v+1$ とすれば問題は(2)に変換でき，これまでの手法が基本的に適用できます．例として，$\lambda=30$，$L=49$での検証例を紹介します．$\alpha=0.10956$です．図3は u の近似解の形状，図4は $v=0$ となる境界部分を包み込んだものです．解は2つの線で囲まれた領域に α 分の H_0^1 ノルムを付け加えた集合に存在します．

有限要素法近似によるそのほかの適用例としては，Emden 方程式[24]，楕円型固有値問題[8]などがあります．

6.3 Navier-Stokes 方程式への拡張

本稿では非線形楕円型境界値問題を例に偏微分方程式の解の精度保証について説明してきました．この手法は2次元定常非圧縮性 Navier-Stokes 方程式：

$$\begin{cases} -\nu\Delta u+\nabla p=-(u\cdot\nabla)u+f & \text{in }\Omega,\\ \operatorname{div}u\quad =0 & \text{in }\Omega,\\ u\quad =0 & \text{on }\partial\Omega \end{cases}$$

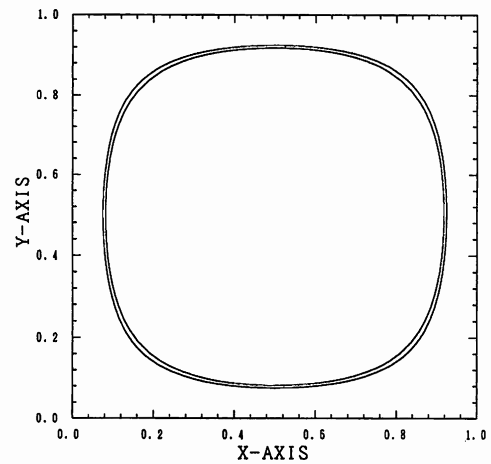

図4 $v=0$ の包み込み

に対しても拡張して適用することができます[22]．Navier-Stokes 方程式の線形化問題は Stokes 方程式：

$$\begin{cases} -\nu\Delta v+\nabla q=g & \text{in } \Omega, \\ \operatorname{div} v \quad =0 & \text{in } \Omega, \\ v \quad =0 & \text{on } \partial\Omega \end{cases}$$

になり，Stokes 方程式の解の存在と一意性を用いて不動点定式化を行ないます．もちろん，5章とは異なる構成的誤差評価が必要になります[13,14]．

7. おわりに

偏微分方程式の精度保証付きシミュレーションの現状は，2次元の楕円型問題がやっと実用レベルに近付いて来たといったところです．発展型方程式[7]，3次元，より複雑な領域への適用などは，原理的な有効性は示されつつあるものの，これからの研究テーマです．また，「不動点定式化できさえすれば必ず不動点定理の成立条件が必ず検証できる」とは決して言えません．縮小的であることの確認のためには，与えられた偏微分方程式と採用した近似空間の特質をうまく利用した「個別撃破」の工夫がどうしても必要になります．これは，偏微分方程式についての統一的な理論が未だ提案されていないことから考えて当然かもしれません．さらに，実用的な観点から，区間演算に要するコストの削減，連立1次方程式や固有値問題などの効率的な解法なども十分に考慮する必要があります．

余 談

精度保証付き数値シミュレーションには，離散化や数値計算の品質保証という「検算」の面のほかに，理論的なアプローチが困難な問題に対する計算機を援用した「解の発見」という一面があります．「この候補者集合は縮小的です！」という結果が画面に表示された時にプログラム作成者が味わう達成感も，精度保証付き数値シミュレーションの魅力(?)のひとつかもしれません．

参 考 文 献

1) R. A. Adams: Sobolev Spaces, 268, Academic Press (1975) ISBN 0-120-44150-0
2) P. Grisvard: Elliptic Problems in Nonsmooth Domains, 410, Pitman, (1985) ISBN 0-273-08647-2
3) 藤田 宏：関数解析，岩波講座・応用数学 5, 244, 岩波書店 (1995) ISBN 4-00-010795-X
4) 菊池文雄：有限要素法の数理—数学的基礎と誤差解析—, 278, 培風館 (1994) ISBN 4-563-03388-X
5) O. A. Ladyzenskaya (ラジゼンスカヤ；藤田宏，竹下彬訳)：非圧縮粘性流の数学的理論，248，産業図書 (1979) ISBN 4-782-80625-6
6) 増田久弥：非線型数学，154，朝倉書店 (1985) ISBN 4-254-11445-1
7) T. Minamoto: Numerical Existence and Uniqueness Proof for Solutions of Nonlinear Hyperbolic Equations, to appear *J. Comput. Appl. Math.*
8) K. Nagatou: A Numerical Method to Verify the Elliptic Eigenvalue Problems Including a Uniqueness Property, *Computing*, **63**, 109/130 (1999)
9) 中尾充宏，山本野人：精度保証付き数値計算—コンピュータによる無限への挑戦—，149，日本評論社 (1998) ISBN 4-535-78258-X
10) M. T. Nakao: Computable L^∞ Error Estimates in the Finite Element Method with Applications to Nonlinear Elliptic Problems, *Contributions in Numerical Mathematics* (ed. R. P. Agarwal), World Scientific, 309/319 (1993)
11) M. T. Nakao and N. Yamamoto: Numerical Verification of Solutions for Nonlinear Elliptic Problems Using L^∞ residual Method, *J. Math. Anal. Appl.*, **217**, 246/262 (1998)
12) M. T. Nakao, N. Yamamoto and S. Kimura: On Best Constant in the Optimal Error Estimates for the H_0^1-projection into Piecewise Polynomial Spaces, *J. Approximation Theory*, **93**, 491/500 (1998)
13) M. T. Nakao, N. Yamamoto and and Y. Watanabe: A Posteriori and Constructive A Priori Error Bounds for Finite Element Solutions of the Stokes Equations, *J. Comput. Appl. Math.*, *91*, 137/158 (1998)
14) M. T. Nakao, N. Yamamoto and Y. Watanabe: Constructive L^2 Error Estimates for Finite Element Solutions of the Stokes Equations, *Reliable Computing*, **4**, 115/124 (1998)
15) 大石進一：非線形解析入門，241，コロナ社 (1997) ISBN 4-339-02600-X
16) M. Plum: Explicit H_2-estimates and Pointwise Bounds for Solutions of Second-order Elliptic Boundary Value Problems, *J. Math. Anal. Appl.*, **165**, 36/61 (1992)
17) 杉原正顯，室田一雄：数値計算法の数理，334，岩波書店，(1994) ISBN 4-00-005518-6
18) 田端正久：微分方程式の数値解法Ⅱ，岩波講座・応用

数学13, 126, 岩波書店 (1994) ISBN 4-00-010803-4
19) 高橋渉：非線形関数解析学—不動点定理とその周辺—, 241, 近代科学社 (1988) ISBN 4-7649-1008-X
20) Y. Watanabe and M. T. Nakao: Numerical Verifications of Solutions for Nonlinear Elliptic Equations, *Japan J. Indust. Appl. Math.*, **10**-1, 165/178 (1993)
21) Y. Watanabe, N. Yamamoto and M. T. Nakao: Verified Computations of Solutions for Nondifferentiable Elliptic Equations Related to MHD Equilibria, *Nonlinear Anal. Theory Methods Appl.*, **28**-3, 577/587 (1997)
22) Y. Watanabe, N. Yamamoto and M. T. Nakao: A Numerical Verification for the Navier-Stokes Equations, *Reliable Computing*, **5**-3, 347/357 (1999)
23) N. Yamamoto and M. T. Nakao: Numerical Verifications of Solutions for Elliptic Equations in Nonconvex Polygonal Domains, *Numer. Math.*, **65**, 503/521 (1993)
24) N. Yamamoto: A Numerical Verification Method for Solutions of Boundary Value Problems with Local Uniqueness by Banach's Fixed-point Thorem, *SIAM J. Numer. Anal.*, **35**-5, 2004/2013 (1998)
25) E. Zeidler (translated by P. R. Wadsack): *Nonlinear Functional Analysis and It's Applications I: Fixed-Point Theorems*, 897, Springer-Verlag (1986) ISBN 0-387-90914-1