平成２９年度 共同利用研究報告書

平成 ２９年 １０月 １７日

九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所長 殿

所属・職名　　　　筑波大学システム情報系・助教

提案者 氏名(ふりがな)　　高安(たかやす)　亮紀(あきとし)

下記の通り共同研究の報告をいたします.

記

	※整理番号	20170020		
1.研究計画題目	爆発解に対する数値的検証理論の構築			
2.種別（○で囲む）	a. 研究集会Ⅰ　b. 研究集会Ⅱ　c.短期共同研究　ⓓ短期研究員			
3.研究代表者	氏名(ふりがな)	高安(たかやす)　亮紀(あきとし)		
	所属部局名	筑波大学システム情報系	職名	助教
	連絡先			
	e-mail		TEL	
4.研究実施期間	平成 ２９年 ７月 １０日（月曜日）～平成 ２９年 ７月 １７日（月曜日）			

5.参加者数・参加者リスト（＊別紙「共同利用研究報告書作成上の注意」参照）
(a,b は参加者数のみ記入し,集会参加者リストを添付. c.の非公開プログラム参加者と d.は参加者リストに記入.
c.は公開プログラムを含めた全参加者数を記入し，公開プログラム参加者リストを添付.）

参加者数：　２　人

参加者リスト（a,b は記入不要，c.は非公開プログラム参加者，d.は共同研究参加者を記入）

氏名(ふりがな)	所属	職名	氏名(ふりがな)	所属	職名
松江(まつえ)　要(かなめ)	九大 IMI・九大 I2CNER	助教			

6.本研究で得られた成果の概要

本研究では微分方程式の解の爆発（有限時刻での発散）を定量的に解明する新たな方法論を構築することを目的とし，本研究期間中に以下のような成果を得た.

1. 擬斉次コンパクト化を利用した爆発解の数値検証理論の構築
2. 固体燃料の発火モデルの爆発解に対する数値検証
3. 半線形熱方程式の解の爆発問題への応用
4. 炎の伝搬モデルの高精度数値計算

数理モデルを用いた現象の把握が常識化している一方で，数理モデルの特異性は起こることは把握できても，具体的にいつ，どのように発現するかは数学解析のみで把握することが難しいため，精度保証付き数値計算を利用する方法論を構築した．本研究期間中は産業界への応用を積極的に考慮し，固体物質の発火を記述する非線形熱方程式の爆発問題や炎の伝搬を記述する Michelson-Sivashinsky 方程式も対象に幅広く研究成果を上げることができた.

平成29年度共同利用成果報告書

爆発解に対する数値的検証理論の構築

高安亮紀　(筑波大学システム情報系)*

平成29 年10 月17 日

1. 成果の概要

本研究では微分方程式の解の爆発（有限時刻での発散）を定量的に解明する新たな方法論を構築することを目的とし, 本研究期間中に以下のような成果を得た.

1. 擬斉次コンパクト化を利用した爆発解の数値検証理論の構築
2. 固体燃料の発火モデルの爆発解に対する数値検証
3. 半線形熱方程式の解の爆発問題への応用
4. 炎の伝搬モデルの高精度数値計算

本研究期間中は産業界への応用を積極的に考慮し, 固体物質の発火を記述する非線形熱方程式の爆発問題や炎の伝搬を記述するMichelson-Sivashinsky 方程式も対象に幅広く研究成果を上げることができた.

以下, 各項目について概説していく.

成果1：擬斉次コンパクト化を利用した爆発解の数値検証

本研究では $\mathbb{R}^n$ 上で定義された, 下記のような自励的常微分方程式系の初期値問題に対する爆発解を考える.

$$\frac{dy(t)}{dt} = f(y(t)), \quad y(0) = y_0. \tag{1}$$

ここで, $t \in [0,T)$ $(0 < T \le \infty)$ とし, $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ は C^1-級, $y_0 \in \mathbb{R}^n$ とする. 初期値問題(1)の解 $\{y(t)\}$ が**爆発解**であるとは, 次で定義される $t_{\max}$ が

$$t_{\max} := \sup\left\{\bar{t} \mid \text{a solution } y \in C^1([0,\bar{t})) \text{ of (1) exists}\right\} < \infty$$

となることをいい, この最大存在時間 $t_{\max}$ は(1)の**爆発時刻**という. 爆発解は微分方程式（非線形熱方程式, Keller-Segel 方程式系など）から導かれる多くの力学系に現れる. 本研究の目的は数値計算を用いて, 具体的な爆発時刻を厳密に解明する.

本研究では(1)のベクトル場が次の性質をみたすと仮定する.

定義 1 (擬斉次ベクトル場[3]) 関数 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ を連続関数, $\alpha_1, \cdots, \alpha_n, k \ge 1$ を自然数とする. f が**型** $(\alpha_1, \cdots, \alpha_n)$, $k+1$ **次の斉次関数**であるとは, f が

$$f(r^{\alpha_1}x_1, \cdots, r^{\alpha_n}x_n) = r^k f(x_1, \cdots, x_n), \quad \forall x \in \mathbb{R}^n, \quad r \in \mathbb{R}$$

をみたすことをいう. また, $f = (f_1, \cdots, f_n)$ が**型** $(\alpha_1, \cdots, \alpha_n)$, $k+1$ **次の擬斉次ベクトル場**であるとは, 各要素 f_j が型 $(\alpha_1, \cdots, \alpha_n)$, $k+\alpha_j$ 次の斉次関数であることをいう.

一般研究_短期研究員（整理番号：20170020）
キーワード：力学系理論, 特異点解消, 精度保証付き数値計算
*e-mail: `takitoshi@risk.tsukuba.ac.jp`

定義 2 (漸近的擬斉次ベクトル場 [5]) 関数 $f=(f_1,\cdots,f_n):\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$ を連続関数とし, f が型 $(\alpha_1,\cdots,\alpha_n)$, $k+1$ 次の**漸近的擬斉次ベクトル場**であるとは,

$$\lim_{r\to+\infty} r^{-(k+\alpha_j)}\left\{f_j(r^{\alpha_1}x_1,\cdots,r^{\alpha_n}x_n)-r^{k+\alpha_j}(f_{\alpha,k})_j(x_1,\cdots,x_n)\right\}=0$$

が $(x_1,\cdots,x_n)\in S^{n-1}$ に対して成り立つことをいう．ここで, $f_{\alpha,k}=((f_{\alpha,k})_1,\cdots,(f_{\alpha,k})_n)$ は型 $(\alpha_1,\cdots,\alpha_n)$, $k+1$ 次の擬斉次ベクトル場である.

このとき我々は次のような許容的コンパクト化を定義した.

定義 3 (擬斉次放物面コンパクト化) 型 $\alpha=(\alpha_1,\cdots,\alpha_n)\in\mathbb{Z}^n_{>0}$ に対して, $\{\beta_i\}_{i=1}^n$ と自然数 c を

$$\alpha_1\beta_1=\alpha_2\beta_2=\cdots=\alpha_n\beta_n\equiv c\in\mathbb{N} \tag{2}$$

をみたすように決定し, 汎関数 $p(y)$ を

$$p(y):=\left(y_1^{2\beta_1}+y_2^{2\beta_2}+\cdots+y_n^{2\beta_n}\right)^{1/2c}$$

とする．型 α の**擬斉次放物面コンパクト化** $T_{para}:\mathbb{R}^n\to\mathcal{D}=\{x\in\mathbb{R}^n\mid p(x)<1\}$ を

$$T_{para}(y):=x,\quad x_i=\frac{y_i}{\kappa(y)^{\alpha_i}}$$

で定義する．ただし $\kappa(y)\equiv\tilde{\kappa}_\alpha(x)$, $\tilde{\kappa}_\alpha(x):=(1-p(x)^{2c})^{-1}$ であり, 次をみたす.

$$y_j=\frac{x_j}{(1-p(x)^{2c})^{\alpha_j}},\quad j=1,\cdots,n.$$

上記コンパクト化により, (1) の時空特異性が解消でき, 常微分方程式系は $\mathcal{D}$ 上で定義される次のような方程式系となる．爆発解は以下の方程式系の漸近挙動を調べる.

$$\frac{dx}{d\tau}=g(x),\ d\tau=(1-p(x)^{2c})^{-k}\left(1-\frac{2c-1}{2c}(1-p(x)^{2c})\right)^{-1}dt.$$

我々は次のアルゴリズムを提案し, 爆発解の数値的検証を可能とした.

アルゴリズム 1 (擬斉次コンパクト化を利用した爆発解の数値的検証) 関数 $f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$ を型 $\alpha=(\alpha_1,\cdots,\alpha_n)$, $k+1$ 次の漸近的擬斉次ベクトル場とする．自然数 $\beta_1,\cdots,\beta_n,c\in\mathbb{N}$ が (2) をみたすように決定する．写像 $T:\mathbb{R}^n\to\mathcal{D}$ を擬斉次放物面コンパクト化とし, それにより時空特異性が解消された常微分方程式系を $\frac{dx}{d\tau}=g(x)$ とする．このとき

1. $g(x)=0$ をみたす $x_*\in\mathcal{E}=\{x\in\mathbb{R}^n\mid p(x)=1\}$ を精度保証付き数値計算によって得る.

2. 部分集合 $\tilde{N}\subset\overline{\mathcal{D}}$ 上において Lyapunov 関数が [7] により定義可能かどうかを検証する．もしできなければ, 検証失敗.

3. $\tilde{N}$ 上で定義された Lyapunov 関数 $L(x)=(x-x_*)^TY(x-x_*)$ に対して, $N:=\{x\in\mathbb{R}^n\mid L(x)\le\epsilon\}\subset\tilde{N}$ を定義し, 常微分方程式系 $(dx/d\tau)=g(x)$ の解を初期値 $x_0\in\mathcal{D}$ から精度保証付き数値計算により追跡し, $\tau=\tau_N$ において $x(\tau_N)\in\mathrm{int}N$ となることを保証する．もしも $x(\tau_N)$ が得られなければ, 検証失敗.

4. 爆発解の上界下界評価を精度保証付き数値計算により計算し, もしも値が有界であれば検証が成功, (1) の解が爆発することと爆発時刻の厳密包含が得られる.

アルゴリズム1を利用することで, 次のような結果を得た. なお, 計算環境は macOS Sierra (ver. 10.12.5), Intel(R) Xeon(R) CPU E5-1680 v2 @ 3.00 GHz を用いて, 精度保証付き数値計算には kv library [4] を用いた. 例として次の常微分方程式系を考える.

$$u' = u^2 - v, \quad v' = \frac{1}{3}u^3. \tag{3}$$

上式 (3) のベクトル場は型 $(1,2)$, 2次の擬斉次ベクトル場である. 従って, 型 $(1,2)$ の擬斉次放物面コンパクト化により得られる特異点解消ベクトル場は

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = (x_1^2 - x_2)F(x) - x_1 G(x) \\ \dot{x}_2 = \frac{1}{3}x_1^3 F(x) - 2x_2 G(x) \end{cases}, \quad \dot{} = \frac{d}{d\tau}.$$

ここで

$$F(x) = \frac{1}{4}\left\{1 + 3(1 - p(x)^4)\right\}, \quad G(x) = x_1^3(x_1^2 - x_2) + \frac{1}{6}x_1^3 x_2.$$

とした. 初期値 $(x_1(0), x_2(0)) = (-0.1, 0.0001)$, $(-0.1, -0.1)$ から解いた結果を表1に示す.

表 1: (3) に対する数値検証結果: 精度保証付き数値計算により $x(\tau_N) \in \mathrm{int}\, N$ が証明され, 爆発時刻 $t_{\max}$ の厳密包含を以下で得た.

初期値	ϵ	τ_N	$t_{\max}$ の包含	計算時間
$(-0.1, 0.0001)$	$5.6700023252180213 \times 10^{-5}$	343.57935744230372	$84.083^{853417007874}_{706663650346}$	1.42 s
$(-0.1, -0.1)$	$5.6700023252180213 \times 10^{-5}$	32.05598188250481	$6.201^{2442938861261}_{0761835235443}$	1.11 s

本研究成果は論文にまとめられ, 現在投稿中（arXiv:1707.05936）である. 論文中では放物-放物型 Keller-Segel 方程式系の球対称解を得るための半離散近似方程式系について, 爆発解の数値検証結果についても記載している.

成果2：固体燃料の発火モデル

本研究では次の常微分方程式系の爆発解の数値的検証法を考える.

$$\begin{cases} u_1' = N^2(-2u_1 + u_2) + e^{u_1}, \\ \qquad \vdots \\ u_i' = N^2(u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}) + e^{u_i}, \ (i = 2, \ldots, N-2) \\ \qquad \vdots \\ u_{N-1}' = N^2(u_{N-2} - 2u_{N-2}) + e^{u_{N-1}}. \end{cases} \tag{4}$$

ここで $' = \frac{d}{dt}$ である. この方程式系は固体燃料の発火 [1] や化学反応による熱暴走 [2] を記述する数理モデル

$$\begin{cases} u_t = u_{xx} + e^u, \ x \in (0,1), \ t > 0, \\ u(t,0) = u(t,1) = 0 \end{cases} \tag{5}$$

の空間一様な格子点 $x_i = i/N$ における有限差分近似 $u_i = u(t, x_i)$ によって得られる半離散近似方程式系である. 方程式 (5) の解が爆発することは, モデルが表す現象の発火時刻を表すため, これを差分近似した常微分方程式系の爆発を考えることはある程度の意味がある. さらに数理的な側面からは, 上で考えてきたように, 我々は多項式の非線形性を持つ常微分方程式系についてはある程度, 爆発解の数値検証ができるようになった [9, 6] が, **指数型**の非線形項を扱うこと

がこれまではできなかった．そこで, 本研究ではこの常微分方程式系に対して爆発解の数値検証法を構築する．

本研究では, **指向的コンパクト化** [5] を採用し,

$$u_{N/2} = s^{-1}, \quad u_i = s^{-1} x_i \quad (i \neq N/2)$$

となる変数変換を行う．そして, 時間変数に関する変数変換 $d\tau/dt = se^{1/s}$ を施すことで, 時間 τ スケールの特異点解消ベクトル場をえる．

$$\begin{aligned}
\dot{s} &= -N^2 e^{-1/s}(x_{N/2-1} - 2 + x_{N/2+1}) - s, \\
&\vdots \\
\dot{x}_i &= -N^2 x_i s^{-1} e^{-1/s}(x_{N/2-1} - 2 + x_{N/2+1}) - x_i + N^2 s^{-1} e^{-1/s}(x_{i-1} - 2x_i + x_{i+1}) + e^{(x_i - 1)/s}, \\
&\quad (i \neq 1, N/2, N-1), \\
&\vdots \\
\dot{x}_1 &= -N^2 x_1 s^{-1} e^{-1/s}(x_{N/2-1} - 2 + x_{N/2+1}) - x_1 + N^2 s^{-1} e^{-1/s}(-2x_1 + x_2) + e^{(x_1 - 1)/s}, \\
\dot{x} &= -N^2 x_{N-1} s^{-1} e^{-1/s}(x_{N/2-1} - 2 + x_{N/2+1}) - x_{N-1} + N^2 s^{-1} e^{-1/s}(x_{N-2} - 2x_{N-1}) + e^{(x_N - 1)/s}
\end{aligned}$$

ここで, $\dot{} = \frac{d}{d\tau}$ である．このとき $(s, x) \to (0, x_*)$ $(\tau \to \infty)$ なる漸近挙動が精度保証付き数値計算によって得られた場合, 時間スケールの逆変換

$$t = \int_0^\infty s^{-1} e^{-1/s} d\tau$$

の厳密な評価によって, 爆発時刻の包含が得られる．本研究は, 理論の整理が研究期間中に終わり, 現在論文を準備中である．

成果 3：半線形熱方程式への応用

これまで常微分方程式系に対する爆発解の数値検証方法を考案してきたが, これを偏微分方程式へと拡張することを本研究では議論した．偏微分方程式の解の爆発については爆発解の存在や爆発レート, 爆発時刻の定性評価が盛んに研究されており, ある程度は爆発現象が解明されつつある．しかし, 解の爆発時刻を定量的に示した研究はこれまでなく, 我々は爆発時刻を（時には精度保証付き数値計算を用いて）明示的に得る方法を模索している．本研究では, 有名な非線形放物型偏微分方程式である半線形熱方程式

$$\begin{cases} u_t = u_{xx} + u^p, \ x \in (-1, 1), \ t > 0, \\ u(-1) = u(1) = 0, \ u(x, t) = u_0(x) \end{cases} \tag{F}$$

の爆発解に議論を絞り, これまで試みてきたコンパクト化による時空特異性の解消法を考案した．

はじめに方程式 (F) は時刻 $t = T$ において $x = a$, $a \in (-1, 1)$ で 1 点爆発することが知られている．そのため, $s = s(t)$ というパラメータを利用して

$$u(x, t) = \frac{\phi(x, t)}{s}$$

と変数変換する．ここで $\phi(a, t) \equiv 1$ と仮定する．

$$u_t = \left(\frac{\phi}{s}\right)_t = s^{-1}\phi_t - s^{-2} s_t \phi = \left(\frac{\phi}{s}\right)_{xx} + \left(\frac{\phi}{s}\right)^p = \frac{1}{s}\phi_{xx} + \left(\frac{\phi}{s}\right)^p, \ t \in (0, T), \ x \in (-1, 1)$$

から $x = a$ とすると

$$-s^{-2} s_t = \frac{1}{s}\phi_{xx}(a, t) + s^{-p}.$$

これと上式から

$$s^{-1}\phi_t + \left(s^{-1}\phi_{xx}(a,t) + s^{-p}\right)\phi = s^{-1}\phi_{xx} + \phi^p s^{-p}.$$

これらを整理すると次の連立常微分-偏微分方程式系が得られる[1].

$$\begin{cases} s_t = -\left\{s\phi_{xx}(a,t) + s^{2-p}\right\}, \\ \phi_t + \left\{\phi_{xx}(a,t) + s^{1-p}\right\}\phi = \phi_{xx} + \phi^p s^{1-p}. \end{cases} \tag{6}$$

ここで (F) のスケール不変性の情報から

$$\frac{d\tau}{dt} = s^{1-p},\ \frac{\partial\phi}{\partial\tau} = \frac{\partial\phi}{\partial t}\frac{dt}{d\tau} = \frac{\partial\phi}{\partial t}s^{p-1}, \quad \frac{d\xi}{dx} = s^{\frac{1-p}{2}},\ \xi = \xi(x)$$

という変数変換を考える. すると (6) は

$$\begin{cases} s_\tau = -\left\{1 + \phi_{\xi\xi}(a_\xi,\tau)\right\}s, \\ \phi_\tau = -\left\{1 + \phi_{\xi\xi}(a_\xi,\tau)\right\}\phi + \phi_{\xi\xi} + \phi^p \end{cases} \tag{7}$$

となる. このとき

$$\xi = \int_0^x s^{\frac{1-p}{2}}d\eta = s^{\frac{1-p}{2}}(\tau)x,\ x \in (-1,1)$$

より ξ の範囲及び境界条件は

$$\xi \in \left(-s^{\frac{1-p}{2}}(\tau), s^{\frac{1-p}{2}}(\tau)\right),\ \phi\left(\pm s^{\frac{1-p}{2}}(\tau)\right) = 0.$$

さらに初期値は

$$s(0) = \frac{1}{u(a,0)},\ \phi(\xi,0) = s(0)u_0(s^{\frac{p-1}{2}}(0)\xi) = \frac{u_0(u(a,0)^{-\frac{p-1}{2}}\xi)}{u(a,0)}$$

で与えられる. これらの変数変換は $t: 0 \to T$ を $\tau: 0 \to \infty$ に $x \in (-1,1)$ を $\xi \in \left(-s^{\frac{1-p}{2}}(\tau), s^{\frac{1-p}{2}}(\tau)\right)$ に移している. 我々は次のような問題を得た.

問題 1 方程式 (7) を $\mathbb{R}$ 上で定義された常微分-偏微分方程式系と考え, 境界条件に $\phi(\xi,\tau) \equiv 0,\ \forall|\xi| \in \left[s^{\frac{1-p}{2}}(\tau), \infty\right)$ を課した際, $s \to 0$ となる解 $(0,\phi_*) \subset \{s=0\}$ の時間大域的意味で適切性が言えるかどうか. さらに

$$t_{\max} = \int_0^\infty s(\tau)^{p-1}d\tau$$

の有界性が示せるかどうか.

本研究期間では上記問題提起のみであったが, 現在は東京理科大学の側島基宏氏を加えた3名で議論が進み, 空間 L^1 ノルムによる正規化を課したコンパクト化を採用することで, 1点爆発という特異な状態を仮定することなしに議論が進められるようになっている. 数学的にも偏微分方程式の解の爆発時刻を表現する公式をみつける議論はこれまでになく, 成功すれば大きな成果となる. さらに産業への応用という観点からも, 爆発時刻の定量的評価は数理モデルの爆発を把握する強力なツールとなる. 例えば解の爆発を利用して, 現象を再現する固体燃料の発火モデルなどのような爆発現象を敢えて利用する数理モデリングの発展を本研究は支え, 理論的にも応用上も有益な成果となる.

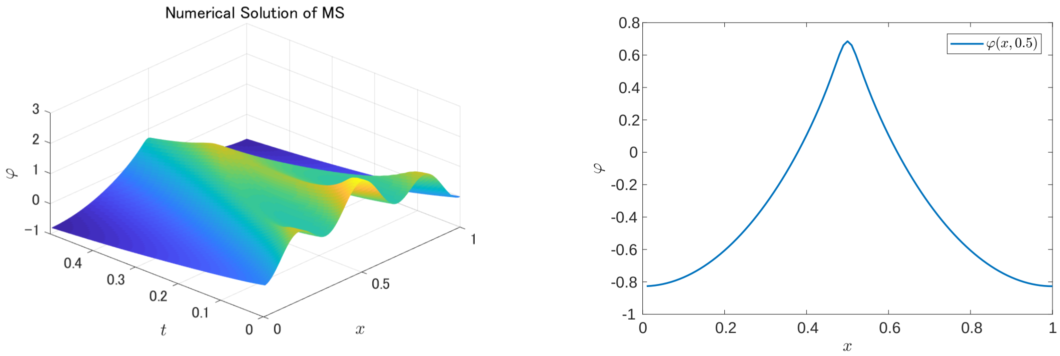
[1] 爆発解のプロファイルは1点爆発を想定しているため, $\phi_{xx}(a,\tau)$ が意味を持つとは限らないし, そもそも微分可能性があるかどうかは今後議論が必要.

成果 4：炎の伝搬モデル

エネルギー問題への応用を見据え, 炎の伝搬を記述する Michelson-Sivashinsky (MS) 方程式 [8] に対する解の精度保証付き数値計算法を議論した. MS 方程式は

$$\varphi_t = \frac{1}{2} I\{\varphi; x\} + \alpha\varphi_{xx} + \frac{1}{2}\varphi_x^2$$

で与えられ, φ が炎の境界面を記述し, I はヒルベルト変換により与えられる非局所項, α はパラメータである. MS 方程式は α がある程度小さいとき, 尖点（cusp）を持つ解が得られることが知られており, これを再現する数値計算例をスペクトル法をもとに実行した. 数値計算結果の一例を図 1 に示す.



(a) (b)

図 1: MS 方程式のフーリエスペクトル法による数値解
(a)：φ の時空間挙動. 初期関数は 3 つの尖点へ遷移し, やがて 1 つの尖点となる.
(b)：$t = 0.5$ の近似解 φ. ある程度時間が立つと, 解は尖点状になる.

本研究期間では MS 方程式の数値計算のみを実行したが, この数値解をもとに精度保証付き数値計算理論を組み立てることは今後の課題である. しかし, MS 方程式に関しては数学的な理論解析（解の安定性や特殊解の表記）が知られているため, あくまで精度保証付き数値計算方法の開発が主な貢献と考えられる.

参考文献

[1] J. Bebernes, D. Eberly, *Mathematical Problems from Combustion Theory*, Springer, 1989.

[2] E.J. Doedel, R.F. Heinemann, *Numerical computation of periodic solution branches and oscillatory dynamics of the stirred tank reactor with $A \to B \to C$ reactions*, Chemical Engineering Science, 38 (1983), pp. 1493–1499.

[3] F. Dumortier, *Techniques in the theory of local bifurcations: Blow-up, normal forms, nilpotent bifurcations, singular perturbations*, In Bifurcations and Periodic Orbits of Vector Fields, pp. 19–73, Springer, 1993.

[4] M. Kashiwagi, *kv - C++ Numerical Verification Libraries*. `http://verifiedby.me/kv/`

[5] K. Matsue, *On blow-up solutions of differential equations with Poincaré-type compactifications*, arXiv preprint (arXiv:1611.06346), 2016.

[6] K. Matsue, A. Takayasu, *Numerical validation of blow-up solutions with quasi-homogeneous compactifications*, arXiv preprint (arXiv:1707.05936), 2017.

[7] K. Matsue, T. Hiwaki, N. Yamamoto, *On the construction of Lyapunov functions with computer assistance*, Journal of Computational and Applied Mathematics, 319 (2017), pp. 385–412.

[8] G. I. Sivashinsky, *Nonlinear analysis of hydrodynamic instability in laminar frames – I. Derivation of basic equations*, Acta Astronautica, 4 (1977), pp. 1177–1206.

[9] A. Takayasu, K. Matsue, T. Sasaki, K. Tanaka, M. Mizuguchi, S. Oishi, *Numerical validation of blow-up solutions of ordinary differential equations*, Journal of Computational and Applied Mathematics, 314 (2017), pp. 10–29.