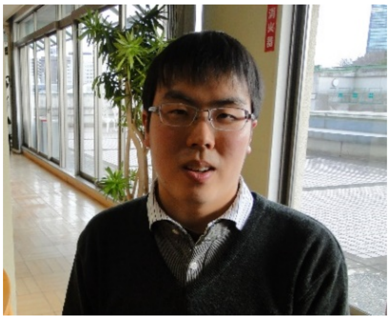
『研究者紹介』インタビューシリーズ

数値シミュレーションを数学で解析

モデルの数学的正当化を引き受ける



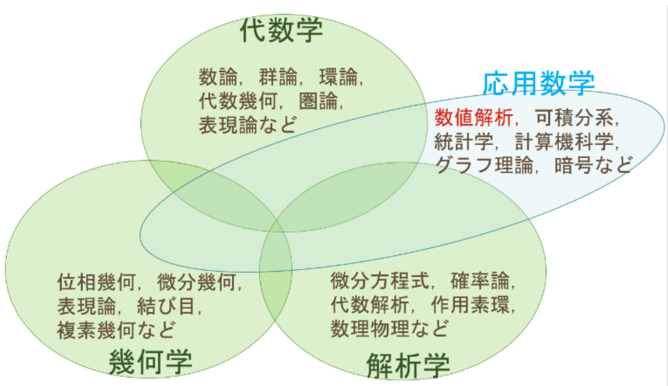
数理科学研究科　数値解析学
柏原　崇人（かしわばら・たかひと）　助教
2009 年東京大学理学部数学科卒業。11 年同大学院数理科学研究科修士過程終了。14 年同大学院数理科学研究科博士課程修了後、ダルムシュタット工科大学数学科博士研究員、岡山大学大学院環境生命学研究科特別契約職員（助教）、東京工業大学大学院理工学研究科数学専攻博士研究員を経て、17 年４月より現職。
2011 年　日本応用数理学会若手優秀講演賞
2018 年　藤原洋数理科学賞奨励賞

（2019 年１月 25 日取材）

慎重な歩みが引き寄せた数値解析との出会い

2018 年に藤原洋数理科学賞奨励賞[i]を受賞したばかりの新進気鋭の数学者であるが、「絶対に数学者になる」というような強い思いや、自信があったわけではなかった。「数学は好きでしたが、将来のことは見えなかった。ともかく目の前のことをしっかりやろう、そうすれば、いつか自分にできることが見えてくるだろう、と思って勉強していました」と話す。

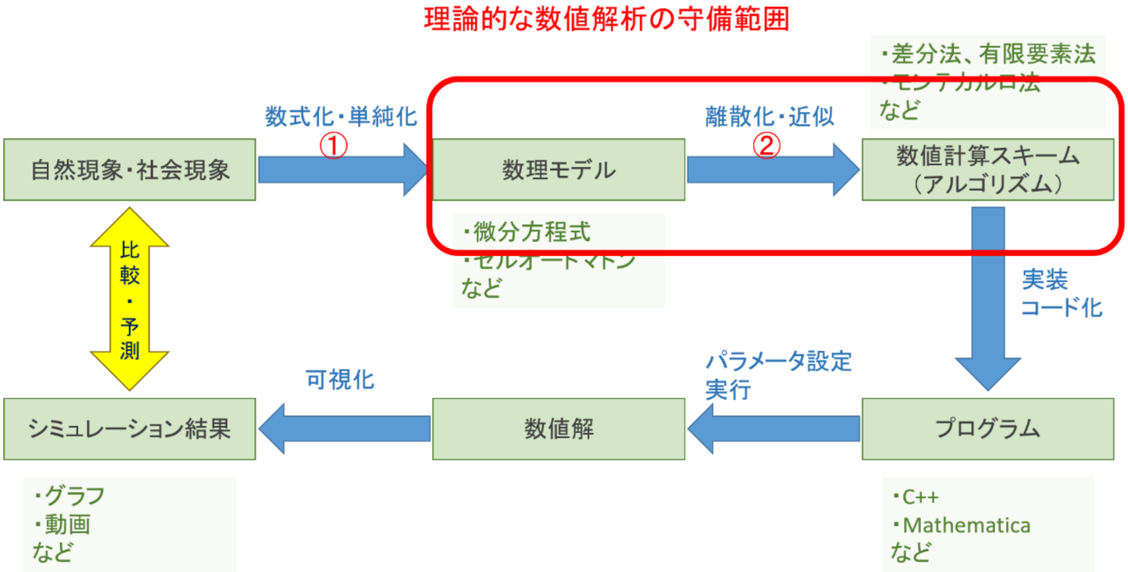
大学院に進学する際にも「研究者になれなかったとしても、つぶしがききそう」という現実的な動機で応用数学への道を選択し、調べていくなかで「偏微分方程式の数値解析」という研究分野があることを知る。もともと、代数、幾何、解析の中では、解析、特に微分方程式に興味をもっていたので、この分野を研究すれば、自身の数学への興味を通して社会にも貢献できるかもしれない、と思ったのが数値解析との出会いである。「やってみると、実に面白く、奥が深い分野でした」



（図）数学の分野

数値シミュレーション『を』数学で解析する

「数値解析というと、一般的には、コンピュータを用いた数値シミュレーション全体を思い浮かべる方が多いかもしれませんが、数学でいう数値解析は、数値シミュレーション『を』数学で解析することを指します（図）」



（図）　数値シミュレーションの流れ

　数値シミュレーションでは、まず、知りたい現象を単純化して「数理モデル」の形にする（①数理化・単純化）。モデルの多くは複雑な微分方程式の形で表わされ、実際に計算することは不可能であるため、コンピュータで計算可能な形に変形する（②離散化・近似）。そうして初めて、式をコンピュータで解いて数値解を出すことができる。この、離散化・近似の過程を数学的に解析するのが「数値解析」の守備範囲である。

数値シミュレーションには誤差が伴う

　数値シミュレーションには、実際には観測できない値を仮想的に再現できたり、コストを削減できたりするメリットがある一方で、モデル化の過程、離散化の過程、計算の過程のそれぞれで、どうしても誤差が生じる。完璧に正しい解というものはありえず「だいたい正しい」というところで妥協するしかない。では、何をもって「だいたい正しい」とするのか。
　「ひとつのアプローチとして、誤差の大きさが許容範囲であることを示す方法（誤差評価）があります。私は主に、離散化の過程（②）で生じる誤差を評価する方法を研究しています。離散化した方程式から得られた解（近似解）が元の式から得られるはずの理論解（厳密解）と『本当に近い』ことを証明できれば、離散化・近似の操作が妥当であったと示すことができます」
　離散化誤差が許容範囲であると証明できれば、問題があったなら、それはモデル化の過程か、計算の過程での誤差であると判断できる。シミュレーションの有用性の保証に向けて大きく前進したことになる。

モデルの数学的正当化を引き受ける

　柏原さんの研究は、数理モデルを選ぶところから始まる。「工学、医学、など、各分野の専門家の方々が数理モデルの設計・構築を担当していて、私はその数学的正当化を引き受ける、そんなイメージです」。モデルの式を離散化した式を立て、解を求める。そして、その解（近似解）と、理論的に正しいはずの解（厳密解）の差（誤差）を計算する。離散化を十分精密にしていく極限のもとで、誤差の値が０に収束していくことが証明できれば、誤差が許容範囲であるということができる。数値解析という学問の歴史の中で、有限差分法、有限要素法、有限体積法など、さまざまな近似方法が確立しており、適切と思

われる方法を選んで計算していくが、ちゃんと離散化を行わないと、うまく収束しない。収束するかどうかは、やってみて初めてわかる。うまく収束させ、解の精度を求めることができれば[ii]、モデルの離散化・近似の正しさが証明できたということで、論文にすべきひとつの成果になる。

前述の藤原洋数理科学賞奨励賞を受賞した研究では、流体の基礎方程式であるNavier-Stokes方程式について検討した。Navier-Stokes方程式は、それ自体、極めて複雑な方程式で、厳密解を求めることはほぼ不可能である。また、流体の数値シミュレーションでは境界条件[iii]によって解が異なり、どのような条件を設定するかから検討する必要があるため、モデルはさらに複雑になる。多様な境界条件の候補の中で、近年、摩擦型境界条件や一般化Robin境界条件といったものが用いられるようになっているが、数学的正当化については十分に検討されておらず、誤差評価以前に、厳密解の存在や一意性（一つに定まるかどうか）についても証明されていなかった。今回の研究は、この２つの条件について解の存在と一意性を証明し、一部については近似解に対する誤差評価を行ったもので、「数値シミュレーション分野への実用性を有する優れた業績」として高く評価された。

「まだ完全に正当化できたわけではないので、今後もこのモデルの研究を続けます。同時に、他のモデルについても正当化を進めていきたいですね」。注目しているモデルがたくさんある、と目を輝かせる。

新しい数値解析の方向性

数値解析の新たな方向性にも思いをはせる。「私が行っている数値解析は、コンピュータが登場した時から行われている、いってみれば伝統的な視点での数値解析です。そうした解析が今後も重要な役割を担い続けることは確かでしょうが、それだけでなく、機械学習やビッグデータ等の現代の科学技術に対する数学的正当化もあってよいのではないかと思っています」

伝統的な数値解析では「誤差が許容範囲であることを示す」という命題がはっきりしていたが、機械学習やビッグデータに対しては、そもそも何を示したら正当化になるのか、というところから考えていくことになる。「簡単ではないかもしれませんが、実現すれば、数値解析の貢献できる範囲はますます広がっていきます」

取材・執筆　梶浦真美（フリーランスライター）
日本数学会　ジャーナリスト・イン・レジデンス

---

[i] 2012年設立。数学の理論を社会に役立てた研究者、社会に役立つ数学理論を作り出した研究者に贈られる。

[ii] （誤差の絶対値）≦定数×h^{α}の形で表したときの次数αが解の精度を示す。ここで、hは離散化の精密さを表す指数で、有限要素法ではメッシュサイズと呼ばれる。

[iii] 解析では、空間全てを対象とすることはできないので、解析空間として有限の領域を設定し、その領域と外との区切り（境界）に条件を設定する。例えば、大動脈の血流を解析する場合には、対象とする大動脈の範囲を決め、その両端や血管壁の条件を決めていく。