様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９、Ｚ－１９　（共通）

科研費
KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ２６ 年　 ６ 月 １０ 日現在

機関番号：１２６０１
研究種目：基盤研究(C)
研究期間：2011～2013
課題番号：２３５６００６３
研究課題名（和文）実用的な構造保存有限要素法の確立に向けた基礎研究

研究課題名（英文）A basic study for establishment of practical structure-preserving finite element method

研究代表者
松尾　宇泰（Matsuo, Takayasu）

東京大学・情報理工学（系）研究科・教授

研究者番号：９０２９３６７０

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　3,700,000円、（間接経費）　1,110,000円

研究成果の概要（和文）：　本研究の目的は，前研究により有限要素法と構造保存数値解法を結びつけて得られた「離散偏導関数法」を実用に耐えうるレベルまで引き上げるための基礎研究を行うことである．
本研究は第一に，Ｌ２射影作用素の概念を導入し，任意の偏微分方程式に対して常に機械的に構造保存有限要素スキームを構成可能であることを示した．これにより，ユーザーは所定の処方箋に沿うだけで自動的に構造保存有限スキームが可能になり，実用性が飛躍的に高まった．第二に，通常の有限要素法よりも計算コストが低く柔軟性が高い不連続ガレルキン法版の離散偏導関数法の原理を新たに提案した．

研究成果の概要（英文）：The aim of the present study is to improve the "discrete partial derivative method" which has been devised in the preceding project of the author by combining finite element method and the concept of structure-preserving methods so that it becomes more practical in actual computations.
In this project, first the author introduced the concept of L2 projection, and by utilizing the concept, proposed a new framework in which we can construct structure-preserving finite element schemes automatically, Due to this, any users can now construct structure-preserving finite element schemes by simply following the procedure, and thus the practicality of the method has been highly improved. Second, we proposed a new principle for a structure-preserving method that bases on discontinuous Galerkin method. This can drastically decrease the computational cost and improve the flexibility of the schemes.

研究分野：応用物理学・工学基礎

科研費の分科・細目：工学基礎

キーワード：数値解析　偏微分方程式

１．研究開始当初の背景

［研究の学術的背景］ 微分方程式の数値解法は現代科学の根幹技術のひとつであり，古くから盛んに研究されてきた．その結果，特に常微分方程式の数値計算法は，1980 年代にはほぼ成熟の域に至ったが，その頃世界的に「構造保存数値解法」と呼ばれる，新しい研究の流れが生まれた．これは Hamilton 系に対する symplectic 数値解法に端を発するもので，方程式のクラスを限定する代わりに，その特徴的な数理構造（時間発展写像の symplectic 性など）を狙い撃ちして再現することで，汎用解法よりも遙かに高性能な専用解法を構成する試みである．その後この概念は他のクラスの問題にも拡張され，現在では数値解析学の大きな一潮流を形成するに至っている．

この流れと独立に，1990 年代に我が国では偏微分方程式（以下 PDE と略す）に対する構造保存数値解法が提唱された．これは保存系（光ソリトンを記述する非線形 Schroedinger 方程式など）や散逸系（相分離を記述する Cahn-Hilliard 方程式など）の多くが，何らかの物理的エネルギーの変分形で表現されていることに着目し，その変分構造を離散系でも再現することで，エネルギーの保存性・散逸性を適切に再現する数値計算法である．現在では「離散変分法」と呼ばれるこの手法は，その後本研究代表者も加わり盛んに研究され，幅広い問題クラスに対して安定かつ物理的により適切な解を導くことが検証されている．また PDE に対する強力な構造保存数値解法の一つとして，当該分野の

代表的モノグラフで節を割いて解説されるに至ったほか．本手法をまとめた洋書が，世界初の PDE 用構造保存数値解法の専門書として，本年研究代表者らにより出版された．

ところで，離散変分法は非常に強力な手法であるが，差分法をベースとしているために，本質的に空間高次元の問題には対処しづらい欠点がある．これを克服するため，研究代表者は 2005 年頃から２つの若手研究科研費の支援を受けて離散変分法と有限要素法の融合に着手し，「離散偏導関数法」と呼ぶ新しい枠組の構築に成功した．さらに，空間１，２次元の基本的な問題に対して数値的にその有効性を検証した．

２．研究の目的

研究代表者の究極の目標は，上述の離散偏導関数法の研究を更に推進して，世界に先駆けて実用的な構造保存有限要素法を確立することである．しかし現在有限要素法により現場で解かれている問題は，並列計算技術の急速な進歩により巨大かつ複雑になっており，直ちにこのゴールを掲げるのは現実的でない．本基盤研究は，この究極のゴールのための基礎研究であり，上の目標に向かうために避けて通れない下記の基盤技術を，数値的・数学的・計算科学的に多角的に探究し確立することが目的である．

３．研究の方法

以下のような方法を多面的に模索し，有用な基盤技術の確立を探る．

(T1) 数学的技巧による計算コスト削減：主に以下の３つのアイデアの実用化を目指す．(T1-1) 大規模有限要素法では数学的無矛盾性を犠牲にした安価な「非適合要素」の導入が必須だが，現状の離散偏導関数法では構造保存性が完全に破壊される．この回避手段を数学的に探求する．(T1-2) 非適合要素に依らない方法として，有限要素法の弱形式を弱微分の概念でさらに一般化することで，安価な H1 要素（高々１回微分可能な要素）により任意の高階微分方程式を扱える可能性があり，これを探求する．(T1-3) 前研究において，離散偏導関数法で通常得られる非線形スキームを陰的線形化し大幅に計算量を削減する工夫が見つかっているが，代償として構造保存性が弱まり不安定化する場合があることが分かっている．力学系理論を援用することで，この安定化を目指す．

(T2) HPC(High Performance Computing) 技術による計算コスト削減：(T1) と平行して，実装技術の改善により離散偏導関数法の実用性を高める技術も目指す．具体的には，離散偏導関数法が帰着するタイプの非線形方程式に特化した非線形方程式並列ソルバの開発，連立一次方程式ソルバ部分の GPGPU 技術による高速化技術の開拓などを検討し，離散偏導関数法全体の速度底上げを行う．

(T3) より現実に近い問題における数値的検証：これは上の(T1)，(T2) と平行して行うテーマで，前述の Ginzburg-Landau 方程式に外部磁場を入れたより現実的なモデルの他，Landau-Lifshitz 方程式（磁化モデル），Swift-Hohenberg 方程式（パターン形成），phase field crystal 方程式（同）など，構造保存有限要素法の適用が望まれる方程式系に対して，(T1)，(T2) の成果を適宜織り交ぜて改良した離散偏導関数法を適用し，その数値性能を評価する．これは(T1)，(T2) の進捗を検証するベンチマークであると同時に，より現実に近い大規模問題での構造保存数値解法の有用性を検証する意味も持つ．

４．研究成果

１番目の目標(T1)に対しては，(T1-2)に関連して，Ｌ２射影の概念を新規に導入し，これに基づいて，保存的弱形式を自動的に見つけ出せることを発見した．それに基づき，変分構造を持つほとんどすべての偏微分方程式に対して，機械的に構造保存有限要素スキームを導出する枠組を確立した．これにより，構造保存数値解法に詳しくないユーザーであっても，偏微分方程式の変分構造さえ分かれば，ほぼ自動的に構造保存有限要素スキームを導出できるようになり，実用性が飛躍的

に向上した．

また関連して，当初有望であると考えていた目標(T1-1)に関しては，そもそも非適合要素が，これは構造保存解法に求められる数学的無矛盾性を破壊して計算効率を上げる手法であり，種々の工夫を経ても残念ながらうまく組み合わせることはできないことが判明した．そこで，近年急速に発達している不連続ガレルキン法（近似関数を不連続関数とする有限要素法）との組み合わせを試み，これについては一定の成功を得た．現在，不連続ガレルキン法版の離散偏導関数法の原理に到達した段階であり，今後の研究で改良されていくことが期待される．(T1-3)については，多段階化エネルギーに対して Lyapunov 理論を適用することにより，一定の安定化に成功した．

２番目の目標(T2)に対しては，いくつかの現代的非線形ソルバの性能評価を行った．その結果，ある程度有望ではあるが，現時点では非線形スキームを避け，陰的線形化すべきである，という結論は残念ながら揺るがなかった．

３番目の目標(T3)に対しては，超伝導現象を記述する Ginzburg-Landau 方程式の２次元版に対して，磁場付きであってもある程度高速に計算可能であることを確認した．また，同様に２次元の Swift-Hohenberg 方程式，および Phase Field Crystal 方程式に対しても性能評価を行った．これらについても，特に陰的線形化を行った場合にある程度高速であり，かつ，構造保存解法として解が定性的に適切に振る舞う利点を確認した．これは一定の成果であるが，しかし，実際の物理現象は３次元であり，そのレベルの問題を高速に解くにはいまだ研究が必要である．

５．主な発表論文等
（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計 13 件）

① Y. Miyatake and T. Matsuo, A general framework for finding energy dissipative/conservative H^1-Galerkin schemes and their underlying H^1-weak forms for nonlinear evolution equations, to appear in BIT, 2014.
② T. Matsuo and D. Furihata, A stabilization of multistep linearly-implicit schemes for dissipative systems, J. Comput. Appl. Math., 264, 38–48, 2014.
③ H. Kuramae and T. Matsuo, An alternating discrete variational derivative method for coupled partial differential equations, JSIAM Letters, 4, 29–32, 2013.
④ Y. Miyatake and T. Matsuo, Conservative Finite Difference Schemes for the Degasperis-Procesi Equation, J. Comput. Appl. Math., 236, 3728-3740, 2012.

〔学会発表〕（計 34 件）

① T. Matsuo, Y. Aimoto and Y. Miyatake, A discontinuous Galerkin method based on variational structures, Czech-Japanese Seminar in Applied Mathematics, (Tokyo, Sep. 5-8), 2013.
② T. Matsuo, Discretization of a nonlocal nonlinear wave equation preserving its variational structure, The Third International Conference: Nonlinear Waves-Theory and Applications, (Beijing, June 12-15), 2013.
③ T. Matsuo, Stable and fast integration of PDEs describing pattern formations, FoCM11, (Budapest (Hungary), July 4-14), 2011.

〔図書〕（計１件）

① D. Furihata and T. Matsuo, Discrete Variational Derivative Method: A Structure-Preserving Method for Partial Differential Equations, CRC Press, Boca Raton, 2011, 376.

〔産業財産権〕
○出願状況（計０件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

○取得状況（計０件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕
ホームページ等
http://www.sr3.t.u-tokyo.ac.jp/matsuo/

６．研究組織
(1)研究代表者

松尾宇泰（MATSUO, Takayasu）
東京大学・大学院情報理工学系研究科・教

授

研究者番号：90293670

(2)研究分担者

( )

研究者番号：

(3)連携研究者

( )

研究者番号：