様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９　（共通）

# 科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ３０ 年　 ６ 月　 ５ 日現在

機関番号：１４４０１
研究種目：基盤研究(B)（一般）
研究期間：2013～2017
課題番号：２５２８７０３０

研究課題名（和文）離散関数解析と変分理論からなる差分法の基礎理論構築

研究課題名（英文）Construction of fundamental theory of difference method based on discrete function analysis and variational theory

研究代表者
降籏　大介（Furihata, Daisuke）

大阪大学・サイバーメディアセンター・教授

研究者番号：８０２４２０１４

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　11,300,000円

研究成果の概要（和文）：離散関数解析，変分理論の構成についてわれわれは研究を行い、微積分作用素間関係の離散的対応と差分作用素のなす空間における差分変換行列の概念を提唱、数学的評価を行うとともに、これらの結果を用いて一定の微積分不等式の離散版を統一的に証明するとともに、それらを成立させる数学的条件などについて研究を進めた．証明技法に関する議論により数学的制約の理解を深め、本議論がより広い関数空間で成り立つ強い示唆を得た．また、変分理論で用いる主要な概念の離散定義を拡張する研究も推進した．これにより、グリーン定理などの基本関係式の離散版に基づき離散変分理論概念を拡張し、差分法のさらなる数学的基盤を定義した

研究成果の概要（英文）：We have studied the discrete function analysis and the discrete variational theory. We proposed the concept of the discrete transformation matrix in the space defined via difference operators based on discrete calculus between differential operators and integral ones and evaluated those mathematically.Based on these results, we proved some discrete differential-integral inequalities in general and studied mathematical conditions to satisfy them.We have deepened the understanding of mathematical constraints by discussing the proof technique and gained a rigorous suggestion that this argument holds in wider function spaces.
We also promoted research to extend the discrete definitions of key concepts used in discrete variational theory.As a result, the discrete variational theory concept was extended based on the discrete version of the basic relational expression such as the Green theory, and the further mathematical basis of the difference method was defined.

研究分野：微分方程式の構造保存数値解法

キーワード：構造保存数値解法　偏微分方程式　差分法　変分理論　離散変分導関数法

## １．研究開始当初の背景

### (1) 差分法の問題点と比較対象としての有限要素法

差分法はその簡明さから広く普及したが，メッシュ自由度が高く数学的性能評価も可能な有限要素法に主役の座を奪われつつある．その強力さは基底関数近似を関数解析に基づく弱形式化という強固な数学的基盤が支えることに起因するが，差分法にはこうした数学的基盤がない．

しかし扱う問題が複雑化している現在(例えば文献④) には空間 6 階微分項があり，有限要素法での基底関数は計算コストが高い), 複雑な基底関数やプログラミングを必要としない差分法は，再び重要性を増している．よって，有限要素法同様の理論的基盤の導入が差分法にも必要である．

### (2) 差分法に導入する数学的基盤の提案

差分法に導入する数学的基盤では，有限要素法同様に下部構造は関数解析相当になる．ただし関数解析の離散版が必要である．確立されていない分野なため新たな研究を行うことになる．次に上部構造であるが，関数変化を直接扱うことと差分法で空間メッシュ自由度を高くしたいことから，変分を直接扱う変分理論が適切でありこれを採用する．なお，多数の関数評価理論が変分理論より導出される事実は差分法の強力な数学的性能評価の可能性を示唆する．離散版の変分理論も一般に確立していないため，下部構造と整合する形で新たな研究による発展が必要である．そして，これらの数学的基盤により，概要に述べたような様々な利点ももたらされると期待される．

### (3)この提案,目的は有意義と推測できるか: 経緯と既存研究による傍証

これまでわれわれは離散変分導関数法という手法を提案し，%微分方程式の数値解析において差分法と有限要素法の研究を行なってきた(文献 ①-③等)．この手法は，多くの微分方程式の大局的性質がその微分方程式の変分構造に由来することを利用するもので，標語的に言えば，離散版関数解析の一部分に基づいた離散版変分理論の一部分を数学的基盤として数値スキームを構成し，その性能評価をこの数学的基盤を用いて導出するものである．つまり，(2) の提案を狭い範囲で部分的に実現した成功例である．これらの結果から，われわれは変分理論を上部構造に持つ自然な離散関数解析が存在し差分法の数学的基盤となると強く信ずるものである．

### (4) 離散関数解析の困難と克服: 本研究の巧妙さ

適切な指針なくして離散化を行うと離散関数解析は狭い範囲でしか整合せず，通常は汎用的な結果が得られないため，離散関数解析の確立は本来困難である．既存の差分法の理論解析の多くはこうした狭い結果であり，汎用性に欠け,細部の検証すら容易ではない．

しかし，われわれは上部構造である離散変分理論が成立することを離散化指針として使うことでこの困難を克服できると考えている．汎用的な変分理論を上部構造とし，そしてそれを離散化の指針にするというこのアイディアは巧妙かつ強力である．実際，iii. で挙げた成功例は全てこの指針に基づいて研究を進めたものである．

### 引用文献

① D.Furihata, "Finite difference schemes for $\partial u/\partial t = (\partial/\partial x)^\alpha \ \delta G/\delta u$ that inherit energy conservation or dissipation property", J. Comput. Phys., vol. 156, 1999, pp. 181-205.

② D.Furihata, "Finite difference schemes for nonlinear wave equation that inherit energy conservation property", J. Comput. Appl. Math., vol.134, 2001, pp.35-57.

③ (著書) D.Furihata and T.Matsuo, "Discrete Variational Derivative Method: A Structure-preserving Numerical Method for Partial Differential Equations", Chapman and Hall/CRC, Florida, 2010.

④ S.M.Wise, C.Wang and J.S.Lowengrub, "An energy-stable and convergent finite-difference scheme for the phase field crystal equation", SIAM J. Numer. Anal., vol.47, 2009, pp.2269-2288.

## ２．研究の目的

これまで，確たる理論基盤を持たずに用いられてきた差分法という方法論に，確固とした数学的な理論的基盤を与え，それによって有限要素法のような強力かつ理論的な性能評価能力と広汎なメッシュ自由度を与えることが当研究の目的である．高自由度，高速かつ安定な差分法の実現はシミュレーションをはじめとする学術面のみならず，製造業，気象予報等の実学面にも画期的な寄与をもたらす．概念的には，この数学的な理論的基盤の下部構造が関数解析の一貫した離散化に，上部構造が変分理論の一貫した離散化に相当する．そして，この目的が達成されれば，その単純さゆえの利用のしやすさとあいまって差分法の応用現場での実用性は飛躍的に高まると期待している．

### (1) 空間が 1 次元の場合

数学的基盤として以下の概念についてお互いに全て整合する自然な定義，結果を与える．

・離散ノルム，および導出される自然な離散関数空間(離散 Lesbesgue 空間, Hilbert 空間, 離散 Sobolev 空間). Cauchy-Schwartz 不等式, Sobolev 不等式などの基本的な微積分不

等式の離散版．部分積分など，変分理論を構成する基本的な関係式の離散版．積分汎関数，変分導関数など変分理論で用いる主な概念の離散版．
次に，これらの数学的基盤に立脚して，線形作用素理論，Hilbert 空間論などの離散版が構築できることを示す．そしてそれを楕円型偏微分方程式などの種々の基本的問題に適用して，差分法としての理論解析性能を評価する．また，Cahn-Hilliard 方程式や非線形 Schroedinger 方程式などの，変分理論による解評価が強力に行える応用問題にも適用し，同様に理論解析が可能なことを示す．

(2) 空間が 2 次元以上の場合
(1)の結果を参考に，ソボレフ不等式などの空間次元依存性を考慮しつつ同様の事項を目的とする．自由形状領域を扱うために 2 次元以上では一定の方法論が必要なため，それらの方法論ごとに上記事項を調査する．具体的な空間の離散化法としては，直交座標を重ね合わせる重合格子,写像により仮想直交座標を用いる方法,Voronoi メッシュなどの離散変分理論が自然に成立する特殊なメッシュを用いる方法,などがあり，これらについてそれぞれに個別に定義，調査を行う．特に，差分法の理論解析を行う際の実際の能力に違いが出てくると思われるため，これらについては応用問題での理論解析の比較を行う．これにより，「差分法における空間離散化手法の様々な優劣」を明らかにする．

## ３．研究の方法

主たる目的部分である、離散関数解析と離散変分理論の構差のための研究として、以下の記載の，もっとも下の項目が最終的に実現されるように整合性を図りつつ上の項目から順に研究を行った．本部分については，代表者と分担者で密接に連絡を取り，共同で研究をすすめる形態をとった．
(1) 微分, 積分作用素を離散化する. ただし，空間対称性を失わないこと，任意微分階数に対して定義可能とすること，階数の異なる作用素間に適切な変換関係を確保すること，なるべく逆作用素の性質を失わないこととする．
(2) 離散ノルムを定義し，それにより自然に導出される離散関数空間を定義する．具体的には少なくとも離散 Lesbesgue 空間，離散 Hilbert 空間，離散 Sobolev 空間が必要となる．
(3) 可能なかぎり整合する離散 Fourier 変換の導入を試みる(通常の意味での離散 Fourier 変換は既知であるが，離散関数解析全体との整合は難しいと予想している). 実現できれば, 以下の (4) の様々な微積分不等式の証明が数学的に素直なものになることが期待でき，また，離散 Sobolev 不等式指数などが整数値だけでなく実数値をとれるなど最終的な差分法の理論性能評価能力が相当程度高まると期待される．
(4) 離散 Cauchy-Schwartz 不等式，離散 Sobolev 不等式, 離散 Gagliardo-Nirenberg 不等式，離散 Poincare-Wirtinger 不等式など，基本的な微積分不等式の離散版を導出する．これらは関数解析における主要な不等式であり，差分法の理論性能評価に欠かせない一連の強力な道具となる．
(5) 部分積分など，変分理論を構成する基本的な関係式の離散版を導出する．
(6) 積分汎関数，変分導関数など変分理論で用いる主な概念の離散版を定義する．そして，これらを用いて最終的に離散版変分理論の骨子を構成する．
ここまで研究を遂行できれば，空間 1 次元の場合の差分法の数学的基盤が構成できる．

## ４．研究成果

(1) まず主たる目的および成果として、離散関数解析，変分理論の構成を空間１次元領域問題に限定し離散ノルムとそれによって自然に導出される離散関数空間、例えば離散ルベーグ空間や離散ヒルベルト空間、離散ソボレフ空間の定義を与えてその数学的な性質を調べた．これはいわゆる微積分作用素間関係について離散的な対応物について調べる視点である．この研究により、例えば、離散ノルムに基づく離散関数空間において、離散 L2 ノルムに限定したソボレフ次数 p に依存しない結果を整理し拡張した．また離散ポアンカレ・ヴィルティンガー不等式などの離散版についても研究を進めた．また、変分理論で用いる主要な概念の離散定義を拡張する研究も推進した．より具体的には、グリーン定理などの基本関係式の離散版に基づき離散変分理論概念を拡張した．これらにより、一次元問題での差分法の数学的理論基盤が築け、離散不等式を介して差分法の性能評価能力と空間離散化の自由度をともに拡張できた．これは、具体的な偏微分方程式、例えばカーン・ヒリアード方程式、非線形シュレディンガー方程式といった問題に適用できる．こうした問題は研究代表者と研究分担者がそれぞれ研究対象としており、分担によりより効率的な研究を推進できた．
またこのとき、基本的な差分作用素が構成する離散関数空間において、対称性を失わないある中心差分作用素の族に対して作用素同士を変換する差分変換行列の概念を用いて離散ソボレフ不等式などの一般的な微積分不等式の性質が統一的に証明できることを見出した．また、さらにそれらを成立させる数学的条件などについてさらに研究を進め、証明の技法に関する研究を通じて、この議論に含まれる数学的な制約の本質を理解し、この理解によって、いくばくかの数学的修正を通じて、より広い関数空間でこれらの結果の拡張が成立するとの強い示唆を得るに至っ

た.

(2) 本研究の周辺分野の調査，知見の統合として常微分方程式分野よりいくつかの知見を得て研究をすすめ、一つは合成した複数スキームの安定性議論，関数空間上での Lyapunov 関数の挙動を合成パラメータで評価する成果を得た．また，予測子修正子法を構造保存解法の枠組みの中で用いる試みも優れた成果を得た．これは非線形問題の数値解法を高速化する優れた手法であり，構造保存解法に組み入れることで大変に実用性を高めることが確かめられた.

(3) また、これらの理論に基づき定義空間次元を二次元以上に拡張し、差分法のさらなる数学的基盤を定義した．この問題は本質的に困難であったが、空間離散化におけるボロノイ格子は空間離散化の自由度とグリーン関係式のもととなる数学的な性質、空間平滑性、の双方の性質を保持することから、このボロノイ格子を用いてこの目標を達成できた.

## 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 ５件）

① Yushi Morijiri, Kensuke Aishima, and Takayasu Matsuo,
"Extension of an error analysis of the randomized Kaczmarz method for inconsistent linear systems",
JSIAM Letters, Vol.10, 2018, pp.17-20.
DOI: 10.14495/jsiaml.10.17

② Daisuke Furihata, Mihaely Kovaecs, Stig Larsson and Fredrik Lindgren,
"Strong Convergence of a Fully Discrete Finite Element Approximation of the Stochastic Cahn--Hilliard Equation",
SIAM J. Numer. Anal., Vol.56(2), 2018, pp.708-731.
DOI: 10.1137/17M1121627

③ Yuto Miyatake, David Cohen, Daisuke Furihata and Takayasu Matsuo,
"Geometric numerical integrators for Hunter--Saxton-like equations",
Japan J. Indust. Appl. Math., Vol.34(2), 2017,pp.441-472.
DOI: 10.1007/s13160-017-0252-1

④ Hiroki Kojima, Takayasu Matsuo and Daisuke Furihata,
"Some Discrete Inequalities for Central-Difference Type Operators",
Mathematics of Computation, Vol.86(306), 2017, pp.1719-1739.
DOI: 10.1090/mcom/3154

⑤ Daisuke Furihata, Shun Sato and Takayasu Matsuo,
"A novel discrete variational derivative method using average-difference methods",
JSIAM Letters, Vol.8, 2016, pp.81–84.
DOI:10.14495/jsiaml.8.81

〔学会発表〕（計　６件）

① T. Matsuo and Y. Miyatake,
"Toward Modern Scientific Computations Based on Structure-Preserving Methods",
SIAM PP 2018, Tokyo, March 7-10.

② T. Matsuo,
"Some structure-preserving discretizations of generalized Ostrovsky equation",
International Conference on Scientific Computation and Differential Equations (SciCADE),Bath University, Bath, UK, 11-15, Sept., 2017.

③ Daisuke Furihata,
"Discrete Variational Derivative Method based on Green--Gauss formulae for Voronoi Cell",
International Conference on Scientific Computation and Differential Equations (SciCADE),Bath University, Bath, UK, 11-15 Sept., 2017.

④ S. Sato and T. Matsuo,
"On spatial discretization of evolutionary differential equations on the periodic domain with a mixed derivative",
International Conference on Scientific Computation and Differential Equations (SciCADE),Bath University, Bath, UK, 11-15 Sept., 2017.

⑤ T. Matsuo,
"On some finite-difference based structure-preserving methods for partial differential equations",
EASIAM 2017, Seoul, Korea, 22-25 June 2017.

⑥ Daisuke Furihata,
"Structure-preserving method on Voronoi cells",
Connections in Geometric Numerical Integration and Structure-preserving Discretization,BIRS, Banff, Canada, **invited talk**, 15th June 2017.

## ６．研究組織
(1)研究代表者
降籏 大介（FURIHATA，Daisuke）

　大阪大学・サイバーメディアセンター・教
授
研究者番号：８０２４２０１４

(2)研究分担者
　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