様 式 C－19、F－19－1、Z－19 （共通）

科研費 KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

令和　元 年　 6 月　 2 日現在

機関番号：１４５０１
研究種目：基盤研究(C)（一般）
研究期間：2014～2018
課題番号：２６４００２００
研究課題名（和文）有限要素外積解析と離散力学理論の融合

研究課題名（英文）Combination of finite element exterior calculus and discrete mechanics

研究代表者
谷口　隆晴（Yaguchi, Takaharu）

神戸大学・システム情報学研究科・准教授

研究者番号：１０３９６８２２

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　3,500,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では，有限要素外積解析と離散力学理論による構造保存型数値解法を連携させる方法についての研究を行った．まず，理論面からの研究成果として，有限要素外積解析による数値計算法が基礎としている変分問題を利用し，有限要素外積解析と解析力学の枠組みを結びつけた．また，それに基づいて数値計算法を導出するための方法を提案した．実務面からの研究成果として，有限要素外積解析による数値計算方法で必要であった，離散調和形式の導出を，反復法で回避する手法を考案した．これにより，数値計算時における計算コストの大幅な削減を可能とすることができる．

研究成果の学術的意義や社会的意義
有限要素外積解析は，主に電磁波のシミュレーションで用いられるシミュレーション手法に関する最新の研究である．この理論は，電磁波の物理学の背景に存在する幾何学的な構造をうまく取り入れてシミュレーションを行う方法であり，従来法では計算が困難であった様々な現象に対して有効なシミュレーション手法を導出する．一方，この方法は，基本的に静電場解析を対象としており，時間の経過とともに変化する現象については適用が困難であった．本研究では，この手法を離散版の解析力学の枠組みに組み込むことで，時間変化する現象に拡張したものである．

研究成果の概要（英文）：In this study, we combined the finite element external calculus and the structural-preserving numerical methods derived by discrete mechanics. First, as a significant result from the theoretical perspective, we derived a variational problem for Hamilton equations in which that by the finite element exterior calculus is naturally integrated. Also, we proposed a method to derive structure-preserving numerical schemes based on this variational problem. From the practical perspective, we proposed a method to avoid the computation of the space of discrete harmonic forms, which was necessary in the numerical calculations in the finite element exterior calculus. By using this method, the computational costs required by the numerical scheme can be significantly reduced.

研究分野：数値解析

キーワード：有限要素外積解析　離散力学　エネルギー保存型数値解法　変分原理　解析力学

１．研究開始当初の背景

有限要素外積解析は，幾何学的な構造をもつ偏微分方程式に対し，その構造を利用することで，安定かつ適合的，したがって収束性が保証された有限要素スキームを導出するための方法である．この方法は，特に電磁気学における辺要素有限要素法に関する研究を背景としている．辺要素有限要素法は，1980 年代頃から使われ始めた方法であるが，数値計算上はうまくいくものの，なぜ，うまくいくのか，その理由については，なかなか明らかにならなかった．これに対して，実は電磁気学における基礎方程式である Maxwell 方程式の幾何学的な構造が関係しているという指摘が Bossavit によって指摘された．これをきっかけとして，Maxwell 方程式を微分幾何学の観点から考え直し，有限要素法の枠組みを Hodge-de Rham 理論を用いて構成し直したものが有限要素法外積解析である．ただし，この方法は，主に楕円型の偏微分方程式に対してのみに利用されており，時間発展型の偏微分方程式に対する拡張は，まだ，少なかった．

２．研究の目的

有限要素外積解析は楕円型偏微分方程式に対する手法として提案されていた．特に，方程式のもつ微分幾何学的な構造を保つことで計算手法を導出するため，空間方向の構造保存型数値解法であると言われる．本研究では，これと，研究代表者らが研究を進めてきた，時間方向の構造保存型数値解法を連携させ，時間・空間方向の両方に関して構造保存となる，強力な数値計算方法の導出を目指した．

３．研究の方法

主なアイデアは，変分原理を用いて 2 つの理論を結びつけることである．有限要素外積解析は，混合型有限要素法に基づく理論であるが，有限要素法で一般的であるように，まず，弱形式を求め，それを有限次元に制限することで数値計算方法を導出する．このとき，弱形式の背景には，変分原理が存在していることが多い．一方，時間方向の構造保存型数値解法についても，対象となる微分方程式は解析力学で導出可能な方程式が中心であり，やはり，変分原理が背景に存在する．そこで，本研究では，変分原理を中心として 2 つの理論を結びつけ，両者の連携を達成した．また，変分原理自体についても，従来，用いていたラグランジュ力学における変分原理に加え，ハミルトン力学における変分原理や，散逸型方程式に対する変分原理などを利用し，手法の適用範囲を広げた．また，楽器の数値計算を中心として，応用分野への研究を行ったり，有限要素法外積解析の差分法版である離散外積解析という手法などについても研究を進めた．

４．研究成果

主要な研究成果は下記のとおりである．

(1) 有限要素外積解析が基礎とする弱形式の背後に存在する変分原理を応用し，実際に，波動型の偏微分方程式などに対して，有限要素外積解析による空間離散化法と，エネルギー保存型数値解法や離散力学による数値解法が連携可能であることを証明した．また，実際に数値計算法を導出し，数値実験上も有効性を確かめた．本手法については，国際会議などでも，一定の評価があり，ゲージ理論との関係など，様々な指摘を頂いた．これについては，今後の研究の中で検討していきたい．

(2) 有限要素法外積解析は，ラプラシアンやベクトルラプラシアンなどが主な離散化対象となる．このような作用素を時間方向の時間発展と組み合わせると，先述の波動方程式に加えて，熱拡散方程式をはじめとする散逸型の方程式が導出される．しかし，これまで，研究代表者らが構築してきた手法は，解析力学に基づく手法であり，散逸型方程式などは手法の対象に含まれていなかった．これに対して，本研究では，Caldirola や Kanai が提案していた，散逸型方程式に対する変分原理などを利用し，手法の適用範囲を散逸型に拡張した．本研究では，この変分原理を Caldirola-Kanai 型変分原理と呼ぶが，これは，ラグランジアンを単純に積分した通常の作用積分の代わりに，ラグランジアンに重み付けをして積分したものを作用積分として利用する．そのように設定したラグランジアンを用いて変分原理を適用すると，散逸型の偏微分方程式が導出される．また，通常の解析力学では，Noether の定理と呼ばれる定理により，系を定めるラグランジアンが対称性をもつとき，その対称性に関係した保存則が導かれることが知られている．上記の散逸型変分原理についても，Noether の定理を適用すると，例えば，本来，エネルギー保存則を導くはずの時間対称性からは，エネルギーおよびエネルギー減衰量の合計に関するある種の保存則が導かれ，これを整理すると，エネルギーの減衰性が示される．また，幾何学的にも，通常の解析力学では，シンプレクティック性と呼ばれる，シンプレクティック形式という微分 2 形式が保存する性質が知られており，これは，局所的に，ハミルトン系を特徴づける性質であることが知られている．上記の散逸系についても，やはり同様に，シンプレクティック性について調べると，シンプレクティック形式の保存則の代わりにシンプレ

クティック形式が収縮していくことが示された．このような，幾何学的挙動を示す方程式はバーコフ系と呼ばれ，シンプレクティック数値積分法などを形式的に適用することで，バーコフ系が保存された数値計算法が導出できることも明らかになった．

(3) 2 つの理論の連携にあたり，既存の時間方向構造保存型数値解法の幾何学的な構造を明らかにした．特に，これまでは，離散勾配と呼ばれる勾配の離散版が数値計算法の導出に必要であったが，勾配の定義には内積，従って計量が必要となる．実際，勾配は，関数のフレシェ微分を，内積を用いてベクトルに書き換えたものと考えることができる．一方で，有限要素法のスキームで用いられる弱形式は汎関数としての等式のような形となっており，スキームを双対空間上で記述したような形になっている．すなわち，必ずしも，計量を用いてベクトルとしての等式に変換していない．そこで，既存の時間方向構造保存型数値計算法についても，計量を用いない記述が可能かどうかを調べた．その結果，多くの場合，数値計算方法は計量に依存せずに定まり，そこから双対空間上の記述が可能であることが分かった．

(4) 既存の時間方向構造保存型数値解法は，ラグランジュ力学に基づくものであったが，これをハミルトン力学における変分原理を利用することで，ハミルトン力学に拡張した．これによって，KdV 方程式をはじめとする，ハミルトン偏微分方程式として自然に定式化出来るが，ラグランジュ力学の枠組みへ変換することが難しい方程式が扱えるようになる．実際に，KdV 方程式を，相空間上に定まる概複素構造を用いた変分原理によって導出し，それに基づいて数値計算方法を導出した．理論的には，エネルギー保存則などが導けたが，離散化の上で生じる行列の性質が悪く，数値計算方法としては，安定性に欠くものとなってしまった．これについえては，今後，さらなる検討が必要である．

(5) 変分原理を利用した構造保存型数値解法を用いるためには，離散版の変分計算のような計算が必要となる．これは，専門家にとっては難しい計算ではないが，一方，一般的なシミュレーションの利用者にとっては，数式の複雑さなどから，理解・修得が難しく，利用の妨げとなっていた．そこで，本研究では，自動離散微分というアルゴリズムを新たに開発し，離散版の変分計算を自動化する手法を提案した．自動離散微分の基本的なアイデアは，高速自動微分と呼ばれる方法と同一である．通常，関数は，指数関数や三角関数などの基本的な関数と，それらの四則演算の繰り返しで計算される．高速自動微分では，関数の計算手順を計算グラフというグラフで表す．グラフの頂点は，四則演算や関数評価など，関数の計算の途中で行う各演算が対応する．この各演算について，合成関数の微分則や，積の微分則などを適用し，個別に微分値を計算し，それを組み合わせれば，関数の微分値が計算可能となる．これをうまく利用し，与えられた関数を計算する計算グラフから，自動的に，その関数の微分値が計算できる．なお，このアルゴリズムは，現在，深層学習などで用いられている誤差逆伝播法と同一である．本研究では，このアイデアを応用し，離散的変分計算に必要な離散微分を自動的に導出する方法を考案した．離散微分は，特殊な場合については，通常の微分に一致するように定義されているため，提案したアルゴリズムは，実は，通常の微分も計算可能である．その意味で，自動微分の拡張となっている．提案したアルゴリズムは，C++などの機能である演算子オーバーロードを用いて実装可能であり，ユーザーは，エネルギー関数を計算するプログラムを記述するだけで，構造保存型数値解法を用いたシミュレーションが可能となる．

(6) 有限要素外積解析の数値計算法では，数値解を求めるために，離散調和形式を計算する必要がある．有限要素外積解析で対象とする方程式は，ポテンシャル関数などを解に含み，空間の幾何学的性質によっては，解が一意に定まらない．離散調和形式は，解を一意に定めるために必要であり，実際には，有限要素法を用いて方程式を離散化することで得られる行列のカーネルを計算することで計算可能である．しかし，これは，計算量を大きく増大させてしまうため，可能であれば，計算を回避したい．これに対して，本研究では，数値解を求める際に解くことが必要となる連立方程式を，反復法を用いて解き，特に用いる反復法を慎重に選ぶことで，得られた数値解が有限要素法外積解析で想定されている数値解に一致するようにする手法を検討した．実際に数値解を求めてみたところ，想定された解に近い解が得られているようであったが，残念ながら，その理論保障は得られなかった．これについては，引き続き，検討が必要である．

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕（計 5 件）

1. T. Satoh and T. Yaguchi, On the equivalence of the norms of the discrete diffrential forms in discrete exterior calculus, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 査読有, 36 (2019) 3-24.
https://link.springer.com/article/10.1007/s13160-018-0334-8
2. A. Ishikawa, D. L. Michels and T. Yaguchi, Geometric-integration tools for the simulation of musical sounds Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics,

Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics，査読有，35 (2018) 511-540. https://link.springer.com/article/10.1007/s13160-017-0292-6
3. 石川 歩惟，谷口 隆晴，ハミルトン方程式に対する離散勾配法の Riemann 構造不変性，日本応用数理学会論文誌，査読有，26 (2016)，381--415. https://www.jstage.jst.go.jp/article/jsiamt/26/4/26_381/_article/-char/ja/
4. A. Ishikawa and T. Yaguchi, Application of the variational principle to deriving energy-preserving schemes for the Hamilton equation，査読有，JSIAM Letters，8 (2016)，53--56. https://www.jstage.jst.go.jp/article/jsiaml/8/0/8_53/_article/-char/ja/
5. A. Ishikawa and T. Yaguchi, Geometric Investigation of the Discrete Gradient Method for the Webster Equation with a Weighted Inner Product，査読有，JSIAM Letters，7 (2015)，17--20. https://doi.org/10.14495/jsiaml.7.17

〔学会発表〕（計 42 件）
1. 佐藤智久，谷口隆晴，有限要素外積解析に対する RRGMRES 法，日本応用数理学会第 14 回研究部会連合発表会，2018.
2. A. Ishikawa，T. Yaguchi，M. Yokokawa，Energy-Preserving Parareal Algorithm for the Hamilton Equation，SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing，2018.
3. 佐藤智久，谷口隆晴，curl-curl 型偏微分方程式に対する有限要素外積解析の応用，2017 年度応用数学合同研究集会，2017.
4. M，Nanbu，T. Yaguchi，M. Yokokawa，Discrete partial derivative method with numerical integrations， the International Conference on Scientific Computation And Differential Equations 2017 (SciCADE 2017)，2017.
5. 佐藤 智久，谷口 隆晴，離散外積解析から導かれる有限積分法のマルチシンプレクティック性について，日本応用数理学会 2017 年度年会，2017.
6. 石川歩惟，谷口 隆晴，速度比例減衰項をもつ系に対する変分原理を利用した数値解法とその比較，第 46 回数値解析シンポジウム，2017.
7. 佐藤智久，谷口 隆晴，離散外積解析における離散 Hodge スター作用素の誤差評価，第 46 回数値解析シンポジウム，2017.
8. 南部匡範，谷口 隆晴，横川三津夫，離散偏導関数法と数値積分の併用，第 46 回数値解析シンポジウム，2017.
9. 長谷阪 祐太，谷口隆晴，ギターの弦とボディの連成シミュレーション，日本応用数理学会環瀬戸内応用数理研究部会第 20 回シンポジウム，2016.
10. 石川 歩惟，谷口 隆晴，変分原理に基づくエネルギー保存数値解法の一般の Hamilton 系への拡張，日本応用数理学会 2016 年度年会，2016.
11. 石川 歩惟，今村 成吾，谷口 隆晴，離散化した heavy-ball-with-friction method のパラメータについて，研究集会「常微分方程式の数値解法とその周辺 2016」，2016.
12. 宮武 勇登，谷口 隆晴，散逸型偏微分方程式に対するある種の変分原理に基づく散逸スキームの導出法，第 45 回数値解析シンポジウム，2016.
13. 石川 歩惟，谷口 隆晴，波動方程式に対するシンプレクティックかつエネルギー保存スキームについて，第 45 回数値解析シンポジウム，2016.
14. 岩井 真理恵，谷口 隆晴，Webster 方程式に対するある数値解法の長時間挙動について，第 45 回数値解析シンポジウム，2016.
15. 南部 匡範，谷口 隆晴，横川 三津夫，曲面上の熱方程式に対する散逸性保存型数値解法の導出と評価，第 45 回数値解析シンポジウム，2016.
16. 谷口隆晴，石川歩惟，自動離散微分とその応用，日本応用数理学会研究部会連合発表会，2016.
17. 谷口隆晴，石川歩惟，Caldirola-Kanai 型変分原理に基づく構造保存型数値解法と多層パーセプトロン学習法への応用について，研究会「数理構造保存を接点とした数学・HPC・実科学のクロスオーバー」，2015

18. T. Yaguchi, A. Ishikawa, Structure-preserving method for a certain class of dissipative differential equations, the International Conference on Scientific Computation And Differential Equations 2015 (SciCADE 2015), 2015.
19. Ishikawa, T. Yaguchi, Energy-preserving discrete gradient schemes for the Hamilton equation based on the variational principle, the International Conference on Scientific Computation And Differential Equations 2015 (SciCADE 2015), 2015.
20. 谷口隆晴，石川歩惟，ある種の散逸型微分方程式に対する構造保存型数値解法，日本応用数理学会 2015 年度年会，2015.
21. 石川歩惟，谷口隆晴，ハミルトン方程式に対する時間対称性を用いた離散勾配スキームの導出法，日本応用数理学会 2015 年度年会，2015.
22. 入江凜，谷口隆晴，シンプレクティック数値積分法による力学的摂動，日本応用数理学会 2015 年度年会，2015.
23. 石川歩惟，谷口隆晴，対称性を利用した離散勾配法における Legendre 変換に関する考察，日本応用数理学会 2015 年度年会，2015.
24. T. Yaguchi, A. Ishikawa, Numerical integrations that preserve energy behaviors using the variational principle, Computational and Geometric Approaches for Nonlinear Phenomena, 2015.
25. T. Yaguchi, A. Ishikawa, Structure-preserving numerical integrators for the KdV equation using an almost complex structure, Recent developments in numerical analysis with special emphasis on complex analysis, 2015.
26. 長谷阪裕太，谷口隆晴，L^2 射影を用いた離散偏導関数法による弦のサウンドレンダリング，第４４回数値解析シンポジウム，2015.
27. 石川歩惟，谷口隆晴，ピアノの物理モデルとその効率的な数値計算法の検討，第４４回数値解析シンポジウム，2015.
28. 入江凜，谷口隆晴，測地線方程式に対する離散勾配法の適用とアインシュタイン方程式の数値解を用いるための基礎検討，日本応用数理学会研究部会連合発表会，2015.
29. 入江凜，谷口隆晴，数値相対論のための測地線方程式に対する構造保存型数値解法の適用，応用数学合同研究集会，2014.
30. 石川歩惟，谷口隆晴，シンプレクティック空間上の離散勾配法，応用数学合同研究集会，2014.
31. Ishikawa and T. Yaguchi, Simulation of Wind Instruments and a Geometric Invariance of the Discrete Gradient Method, Foundations of Computational Mathematics Conference 2014, 2014.
32. T. Yaguchi, On the well-posedness of the weak form of the finite element exterior calculus on manifolds, 流体方程式の構造と特異性に迫る数値解析・数値計算, 2014.
33. 谷口隆晴，ハミルトン偏微分方程式に対する構造保存型数値解法，日本学術会議第４回計算力学シンポジウム，2014.
34. A. Ishikawa, R. Ueda and T. Yaguchi, Application of Structure-Preserving Numerical Methods to Simulation of Musical Instruments, 2nd International Workshop on Numerical Linear Algebra and Its Applications, 2014.
35. 石川歩惟，谷口隆晴，離散勾配法の Riemann 構造不変性とシンプレクティック幾何学的再構築，RIMS 研究集会「新時代の科学技術を牽引する数値解析学」，2014.

36. Ishikawa and T. Yaguchi, Invariance of Furihata's Discrete Gradient Schemes for the Webster Equation with Different Riemannian Structures, 12th International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics (ICNAAM 2014), 2014.
37. T. Yaguchi, Hamiltonian Structures of Wave-Type Equations Compatible with the Finite Element Exterior Calculus, 12th International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics (ICNAAM 2014), 2014.
38. 谷口隆晴，幾何学的構造保存型数値解法に対する力学理論的アプローチ，第３回岐阜数理科学研究会，2014.
39. 谷口隆晴，グラフに対する Ollivier-Ricci 曲率の数値計算，日本応用数理学会 2014 年度年会，2014.
40. 石川歩惟，谷口隆晴，異なる Riemann 構造をもつ Webster 方程式に対する離散変分導関数法の不変性，日本応用数理学会 2014 年度年会，2014.
41. 入江凜，谷口隆晴，シンプレクティック法による摂動を用いた太陽系の安定性検証，第４３回数値解析シンポジウム，2014.
42. 石川歩惟，谷口隆晴，異なる内積により得られる Webster 方程式の２つのハミルトン構造，第４３回数値解析シンポジウム，2014.

〔図書〕（計 0 件）
該当無し.

〔産業財産権〕
該当無し.

〔その他〕
該当無し.

６．研究組織

本研究は，研究代表者が中心となって行い，研究分担者等は設定しなかった.

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。