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 29 年　 5 月 29 日現在

機関番号：１４４０１
研究種目：挑戦的萌芽研究
研究期間：2014～2016
課題番号：２６６１００３８

研究課題名（和文）多次元ボロノイ非構造格子を用いた偏微分方程式の構造保存数値解法

研究課題名（英文）Structure-preserving numerical method for partial differential equations based on Voronoi diagram

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・准教授

研究者番号：８０２４２０１４

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　2,800,000円

研究成果の概要（和文）：本来の差分法が基盤とする ”微分極限操作の離散化” を適切に導入し，多次元領域で任意格子上の Voronoi 離散化による厳密な離散 Green の定理を，勾配、Laplacian に対して、境界項まで含めて証明を付して明確に構成した．これにより Voronoi-Delaunay 分割は優れた数学的性質を保ちつつ任意の格子点配置を許す大変好ましい特質を持つことを示した．
さらに、離散変分導関数法の基盤にこの Voronoi 差分を採用して偏微分方程式の全体を離散化した数値解法を与え、偏微分方程式の数値解法の実用性と理論的基盤の双方を強化した．

研究成果の概要（英文）：The discretization of the differential limiting operation is the base of the original finite difference method. We appropriately introduced it to our study via the Voronoi decomposition and derived the exact discrete Green theorem by Voronoi discretization on the arbitrary lattice in the multidimensional region, e.g., the gradient, Laplacian.Our results include mathematical proofs and mathematically rigorous.
This showed that the Voronoi-Delaunay triangulation has favorable characteristics to allow arbitrary lattice placement while inheriting excellent mathematical properties.Furthermore, we adopted this Voronoi difference as the basis of the discrete variational derivative method to design numerical schemes for some partial differential equations.This indicates that our studies strengthened both the practicality and the theoretical foundation of the numerical solution method of partial differential equations.

研究分野：応用数学

キーワード：構造保存数値解法　離散変分　ボロノイ分割　非構造格子

１．研究開始当初の背景

本研究者は研究申請段階時点までに偏微分方程式の構造保存解法として離散変分導関数法を構築した[2]．これは大域構造がGauss-Green 則(以下 GG 則)などの局所則を用いた変分原理に基づくことから変分原理を離散化し大域構造を再現する手法である．しかし，多次元空間任意格子で離散微積分は一般に GG 則を満たさない(有限体積法は GG 則を満たすが導入される流速ベクトル変数が大域構造則に数学な困難をもたらす).

しかし，流速ベクトル導入無しでの GG 則の成立の十分条件が離散領域境界と格子点間ベクトルの直交性であることを申請者はグラフ理論より導出しており[1], Voronoi 格子はこの条件を満たすことから，任意格子を用いた構造保存解法構築が原理的に可能となる．

また Voronoi 格子が関数離散近似基底格子としてほぼ最良なことが数学的に判明[3]しており， Voronoi 格子離散化に注力した研究を行うことでこうした一連の可能性を追求するべきであると考えた．

引用文献(研究開始当初)
[1] 降籏 大介 , 日本応用数理学会 2009 年年会予稿 , (2009, 大阪), p.241.

[2] D. Furihata and T. Matsuo, Discrete Variational Derivative Method: A Structure-preserving Numerical Method for Partial Differential Equations, Taylor & Francis, Boca Raton, 2010 (著書).

[3] K. Kobayashi, International Council for Industrial and Applied Mathematics, (2011, Vancouver).

２．研究の目的

原則的に直交座標を基盤とする差分法の考え方を基礎として，任意格子上の Voronoi 離散化の利用を提案することで，数学的に優れた性質を保ちつつ領域形状の離散化に高い自由度を与えることが第一の目的である．次に，二次元だけでなく三次元以上の空間においても Voronoi 格子が優れた数学的性質を持つと推測されていることを，実際の数値解析から検証し，できれば数学的にも示すことが第二の目的である．そして， Voronoi 離散化を使った構造保存数値解法によって，系の大域構造を保存したまま偏微分方程式の全体を離散化した数値解法を与え，これによって偏微分方程式の数値解法の実用性と理論的基盤の双方を強化することが第三の目的である．

これらの目的の学術的特色の一点目は Voronoi 格子点配置は任意であるため，空間離散化の自由度を非常に高くできることにある．二点目は，その空間自由度の高さにも関わらず，大域構造を再現する離散変分導関数法が適用可能となる点である．そして結果・意義としては，上の特色によるもので，一点目は格子点を真に自由に配置できるようになる実用的な利点にある．二点目は構造保存解法による大域的性質の離散的な再現にある．これにより優れた近似精度や安定性が得られる実用性とその数学的な事前解析・証明が強く期待される．三点目として，3 次元以上の空間の Voronoi 離散化に関して知見が得られる期待が挙げられる．Voronoi 格子について多くの数学的結果が 2 次元までしか得られていない現状から，この期待の意義は数学的にも実用的にも大きい．

そしてこの研究全体を通じ，偏微分方程式の数値解法理論が一歩大きく前進すると期待できるため、全体を鑑みてこれらを大なる目的とした．

３．研究の方法

本研究の第一の計画および方法は，主に空間二次元，三次元での Voronoi 格子上の離散作用素と GG 則の詳細な調査と，Voronoi 格子上に成立する類似の局所則の探求とした．一般的な混合格子と異なり ，Voronoi 格子は隣接ベクトル - 界面の自然直交性を持つため，複数の重要な局所則が見つかることが強く期待された．また，積分に基づく離散化が苦手とする空間異方性の取扱いも重要であるので，作用素の異方性には特に配慮した．また， Voronoi 格子は幾何的対称性を持たないため，様々な離散量の近似精度は主に一次(特殊な場合で二次)程度と推測されたため、その方向性で研究を進めた．次数の低さは実用上問題であるため，より精度の高い離散化，局所則を見出すことも計画に含めた．

第二の計画・方法においては， C ́ ea の補題などの有限要素法の数学的基盤に対し，Voronoi 格子上の離散化概念における類似の性質を見い出すこととした．幸い，2 次元までの場合は，三角要素上の関数近似誤差上限の優れた評価(誤差がせいぜい 5% 程度)が理論的に得られているため，この研究の方向性はある程度明確であった．3 次元以上の場合は数学的に困難であるが，重要と考えて挑戦課題として取り組んだ．

第三の計画・方法は構造保存解法である離散変分導関数法と Voronoi 格子での作用素離散化を組み合わせ，Cahn-Hilliard 方程式や非線形 Schrodinger 方程式 ,

Gross-Pitaevskii 方程式などの数値求解が困難な問題に「柔軟で使いやすい」差分スキームを提供することであった．具体的な問題に取組むことで境界条件の離散的処理などの実装上の困難を発見できるため，この計画・研究手法は理論の進展の面からみても欠かせないものであった.

４．研究成果

目的と計画に従い、数学的な理論構築についてボロノイ格子の数学的性質について研究を推進した．本質的に、直交性が無い、つまり、トポロジー的な形状が一定でない格子に対する格子形状と微積分則の間に成り立つ局所的関係の構築に関する研究である．まず、平面上のボロノイ格子において離散ガウス-グリーン則を構成することに既に成功しているため、これについてさらなる数学的性質の評価と定式化をすすめた．低い階数での具体的な局所則についてもっとも粗い精度での評価がこれまでのほぼ予測通りに得られていることに加え、より一般的に、微積分の階数によらない数学的表現についても抽象的な表現を得た.

さらに、グリーン則にのっとり、ボロノイ格子分割における境界条件の扱いについて数学的に妥当な制約の表現についても研究を進めた．これについては、これまでの外部に仮想格子点を設けてのシンプルな純粋な点近似に基づくものに加え、境界上格子点のみに属する積分量が境界積分の離散近似であるという知見を得ることに成功した．またボロノイ格子をはじめ、こうした非正則格子上での局所則について、任意計量における微分作用素の表現にもとづいての離散近似について研究を進めた．これはホッジ作用素の離散化についての研究や外微分形式との関連性があり、以前からのわれわれの指摘に合致するものである.

また，応用数学の専門家が集まる国際会議 NASPDE 2016 (Numerical Analysis of Stochastic Partial Differential Equations) や IMI-La Trobe Joint Conference ″Geometric Numerical Integration and its Applications″ などにて研究発表を行い、研究交流をすすめた.

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 6 件）

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

2. Daisuke Furihata, Shun Sato and Takayasu Matsuo, A novel discrete variational derivative method using “average-difference methods,” JSIAM Letters, 8, (2016 Dec.), pp.81--84. DOI:10.14495/jsiaml.8.81

3. Shun Sato, Takayasu Matsuo, Hideyuki Suzuki and Daisuke Furihata, A Lyapunov-type Theorem for Dissipative Numerical Integrators with Adaptive Time-stepping, SIAM Journal on Numerical Analysis, 53(6), (2015 July), pp.2505--2518. DOI: 10.1137/140996719

4. Shun Sato, Takayasu Matsuo, and Daisuke Furihata, An analysis on the asymptotic behavior of multistep linearly implicit schemes for the Duffing equation, JSIAM Letters, 7, (2015 May), pp.45--48. DOI: 10.14495/jsiaml.7.45

5. Daisuke Furihata, Takayasu Matsuo, Discrete variational derivative method --A structure-preserving numerical method for partial differential equations--, AMS Sugaku Expositions, accepted (2015 May 17), will maybe included in vol.28, No.2, 2015.

6. Takayasu Matsuo, and Daisuke Furihata, A stabilization of multistep linearly implicit schemes for dissipative systems, J. Comput. Appl. Math., 264, (2014 July), pp. 38-48. DOI: 10.1016/j.cam.2013.12.028

〔学会発表〕（計 12 件）

1. Daisuke Furihata, Fast computation for nonlinear PDEs via a predictor-corrector iteration based on a structure preserving method, Numerical Analysis for Partial Differential Equations, Tohoku University, 2014 June 20, (招待講演).

2. Daisuke Furihata, A symple introduction of discrete variational derivative method and a predictor corrector algorithm, Numerical Analysis Workshop, Tokyo University, 2014 Sep. 08.

3. Daisuke Furihata, A predictor corrector iteration method based on the discrete variational derivative method, Kyoto

Conference on Numerical Analysis and Differential Equations, Kyoto University, 2014 Sep. 19.

4. Daisuke Furihata, Discrete variational derivative method: A structre-preserving method for partial differential equations, The fifth workshop on computer-assisted science, Osaka University, 2015 Jan. 30.

5. Daisuke Furihata, Asymmetric numerical schemes based on the discrete variational derivative method and a practical application -- to treat strongly nonlinear differential equations --, 8th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM), Beijing, China, 2015 Aug. 12.

6. Daisuke Furihata, Fast and structure-preserving numerical methods for partial differential equations, 2015 International Conference on Scientific Computation and Differential Equations (SciCADE), Potsdam, Germany, 2015 Sep. 14.

7. Daisuke Furihata, A Fast and Asymmetric Structure-Preserving Numerical Method for Partial Differential Equations, The Sixth China-Japan-Korea Joint Conference on Numerical Mathematics, NIMS, Daejeon, Korea, Aug. 23rd, 2016, (招待講演).

8. Daisuke Furihata, Fast and asymmetric structure-preserving numerical methods based on discrete variational derivative for PDEs (poster), Numerical Analysis of Stochastic Partial Differential Equations (NASPDE2016), Chalmers University of Technology/University of Gothenburg, in Gothenburg, Sweden, 6-7th September 2016.

9. Daisuke Furihata, Fast algorithms of discrete variational derivative methods for partial differential equations, International Seminar on Applied Mathematics for Real-world Problems II, Research Institute for Electronic Science (RIES), Hokkaido University, Japan, 29th October 2016.

10. Daisuke Furihata, Fast and structure-preserving schemes for PDEs based on discrete variational derivative method, IMI-La Trobe Joint Conference ”Geometric Numerical Integration and its Applications”, The Institute of Advanced Study, La Trobe University, Bundoora, VIC, Australia, 5th December 2016.

11. Daisuke Furihata, A relaxation of discrete gradient, 2017 NCTS Workshop on Applied Mathematics at Tainan, Gezhi Science Hall C305, Department of Applied Mathematics, National University of Tainan, Taiwan, 6th March 2017.

12. Daisuke Furihata, Relaxations of discrete gradients for differential equations, Third International ACCA-UK/ACCA-JP Workshop, 58 Prince's Gate, Imperical College London, UK, 14th March 2017.

〔図書〕(計 1 件)
世界標準 MIT 教科書 ストラング:計算理工学, 第 6 章「初期値問題」訳, pp.457-547, 日本応用数理学会 監訳, 近代科学社, 2017 年 1 月.

〔その他〕
ホームページ等
http://www.cas.cmc.osaka-u.ac.jp/~paoon/

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・准教授
研究者番号： 80242014