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

令和　６ 年　６ 月 ２１ 日現在

機関番号：３５３０２
研究種目：基盤研究(C)（一般）
研究期間：2018～2023
課題番号：１８Ｋ０３４３８

研究課題名（和文）層状領域における異常拡散方程式に対する代用電荷法の適用と評価

研究課題名（英文）Application of the method of fundamental solutions for abnormal diffusion equations in the layered medium

研究代表者
大江　貴司（Ohe, Takashi）
岡山理科大学・理学部・教授
研究者番号：９０２５８２１０

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　3,100,000円

研究成果の概要（和文）：本研究課題では定常的偏微分方程式の境界値問題の数値解法の一つである代用電荷法（基本解近似解法）の非定常問題、特に異常拡散方程式への適用について考察した。まず初めに時間・空間について同じように離散化するnaiveな手法を検討したところ、小さな時間刻みの場合に数値的に不安定になることが実験的・理論的に確認された。この不安定性に対応するため、時間の離散化手法として Convolution Quadrature Method を適用する手法を開発した。数値実験により検証を行った結果、小さな時間刻みに対しても安定であり、陰的Runge-Kutta法を応用した場合には高次の精度が得られることが確認された。

研究成果の学術的意義や社会的意義
非定常問題に対する代用電荷法（基本解近似解法）の適用に関する従来の研究は、時間離散化について差分法等を用いることで、時間依存の基本解を利用しないものがほとんどであった。これに対し、本研究では時間依存の基本解を用いた直接的な離散化手法について検討した。また、その際に生じる数値的不安定性を除去する手法についても併せて開発した。異常拡散方程式の数値解法は近赤外線を用いたCT法において必要とされており、時に短時間の挙動の解析が需要となっている。この問題に対し、一つの解決手法を与えたことは大きな意義があるものと考えられる。

研究成果の概要（英文）：In this project, we develop an application of the method of fundamental solutions (charge simulation method) for the initial-boundary value problem for the abnormal diffusion equation. At first, we apply a naive implementation for the problem, but we find some numerical instability under the small time-step condition. To avoid this numerical instability, we apply the Convolution Quadrature Method (CQM) to discretize the integration in time. Numerical experiments show that our method is stable even if the time-step is small, and we can obtain a high-precision numerical solution if we apply the implicit Runge-Kutta method in CQM.

研究分野：偏微分方程式の逆問題

キーワード：異常拡散方程式　基本解近似解法　代用電荷法　Convolution Quadrature　後退差分公式　陰的Runge-Kutta法　時間依存基本解

様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９（共通）

１．研究開始当初の背景

代用電荷法（基本解近似解法）は定常的偏微分方程式の境界値問題の数値解法の一つである。この方法は、解を基本解の線型結合で近似するというアイデアを基にしており、領域の形状が単純で境界値が解析的である場合には非常に高精度な近似解を与えることが知られている。特に対象とする方程式が Laplace 方程式および Helmholtz 方程式の場合には数値解の誤差の指数的収束が理論的にも知られている。

その一方で、非定常問題に対する適用については、研究はほとんど進んでいない状況であった。代用電荷法が国内に紹介された 1982 年に簡単な適用例が野中・村島により示されているが、それ以後 2010 年ごろまでほとんど研究発表は海外も含めてないという状況であった。2010 年ごろになっていくつかの結果が発表されたが、その多くにおいて、対象とする方程式そのものの基本解（ここでは時間依存基本解と呼ぶ）を用いる手法ではなく、時間方向について差分法等を用いて離散化し、その際に得られる空間座標に関する Poisson 方程式を代用電荷法により解くというものであった（例えば Valtchev et al(2008) や Yan, et al (2013) など）。その後、2010 年代以降になって、イギリスの Leeds 大学の Lesnic のグループが時間依存基本解を用いた拡散方程式の解法に関する数値的・理論的結果をいくつか発表している（例えば Johansson et al (2011)や Johansson (2017)など）が、不十分なものである。特に Johansson et al (2011)では、時間刻み幅をあまり小さくできないことが言及されているが、その理由に関する分析はなく、不安定性までは踏み込んでいない。

したがって、非定常問題を対象とした時間依存基本解を用いた代用電荷法の適用とその特性の詳細な分析については、本研究課題の開始当初の時期にはまだほとんどなされていない状況であった。また、Johansson et al (2011)で示されている、時間刻み幅を小さくとれない理由とその解決法についても何もわかっていない状況であった。さらに、時間に関する非整数階微分を持つような異常拡散方程式に対しては、全く研究がないという状況であった。

２．研究の目的

上記背景のもと、本研究課題では拡散および異常拡散方程式のような非定常問題に対する数値解法として、代用電荷法の適用について、より詳細な分析を行うことを目的とした。適用においては、基本解近似解法の持つ重要な性質の一つである、近似解の表現が対象とする方程式を厳密に満たすため、時間依存基本解を利用した手法を対象とした。まず、単連結な領域に対する適用を考察し、その中で近似解の持つ数値的性質、特に空間および時間に関する離散化に対する近似解の収束特性などをより詳細に調べることとした。また、Johansson et al (2011)で示されている、拡散方程式の適用において時間刻み幅を小さくとれないという現象について、異常拡散方程式に対しても分析を行うこととした。さらにこの現象について理論解析を行うとともに、解決法について探ることとした。最終的に、層状構造を持つような領域への拡張を行うことを目標とした。

３．研究の方法

上記目的のため、次の段階にわけて研究を実施した。

(1) 代用電荷法を Naïve な手法により適用した場合に対する近似解の構成に必要な時間依存基本解の数値計算法の開発
(2) Naïve な手法を適用した際に得られる近似解の数値的特性。特に、空間刻みや時間刻みを小さくした際の近似解の収束や安定性
(3) Naïve な手法を適用した際に現れる不安定性、特に時間刻みを小さくした際に起こる不安定性の理論解析
(4) 時間刻みを小さくした際に不安定性を生じないような新たな手法の開発。特に時間離散化に対する Convolution Quadrature Method の適用

上記において、「naïve な手法」とは、空間および時間の離散化について、両軸に対し均等に時間依存基本解の特異点をおき、その線型和により近似解を表現する手法である。このアイデアは、基本解近似解法を非定常問題に適用するうえでは自然な考えによるものと考えられた。しかし、この方法は、拡散方程式のみならず異常拡散方程式に対しても、時間刻みを小さくしていく際に不安定性が現れることが本研究課題の遂行中にわかった。詳細は研究成果のところで述べる。なお、目標の一つである層状構造を持つような領域への拡張については実施には至らなかった。

４．研究成果

上に示した各方法により得られた研究成果について示す。

(1) 代用電荷法を naïve な手法により適用した場合に対する近似解の構成に必要な時間依存基本解の数値計算法の開発

代用電荷法を naïve な手法により適用する際には、基本解そのものの数値計算が必要となる。

時間に対し非定常な現象を表す拡散および異常拡散方程式の場合、この基本解は時間依存のものとなる。通常の拡散方程式の場合、これは指数関数を用いて容易に計算が可能であるが、異常拡散方程式の場合には Fox の H 関数を用いて表現されるため、その数値計算法の開発が必要となる。本研究では、２次元の場合には Fox の H 関数が Mittag-Leffler 関数と Bessel 関数を用いた積分で表現できること利用した。具体的には、Mittag-Leffler 関数の計算として Garrappa によるアルゴリズムを、また Bessel 関数を含む積分には緒方-杉原による二重指数関数積分公式を適用する方法を開発した。

(2) Naïve な手法を適用した際に得られる近似解の数値的特性。特に、空間刻みや時間刻みを小さくした際の近似解の収束や安定性

（1）で開発した時間依存基本解の数値計算を基に代用電荷法として naïve な手法を実装し、数値実験を行った。まず単連結な領域に対する適用を行い、その数値的特性について実験的な考察を行った。その結果として次のことが確認された。

A) 時間離散化について、線型和を取る時間依存基本解の特異点の時間間隔をΔtで表したとき、Δtが大きい時には$O(\Delta t)$で誤差が減少するが、ある程度小さくすると不安定性を生じ、ステップを進めるにつれて、数値解が爆発する現象がみられた。
B) 空間離散化については、特異点の空間間隔をΔxとしたとき、数値解の誤差は$1/\Delta x$に対し、指数関数的減少を示すことが確認できた。

この結果のなかで、B の結果は定常問題である Laplace 方程式や Helmholtz 方程式に対する基本解近似解法と同様の結果であり、数値解法として良好なものである。その一方で A の結果は、非常に悲観的なものである。特に、異常拡散方程式の重要な応用例である近赤外線を用いた CT 法では、短時間における解の挙動を追跡する必要がある。B の結果は、Naïve な手法ではこの応用に対して適用は難しいことを意味している。

（1）と（2）の結果は 2020 年に実施された第 26 回環瀬戸内応用数理研究部会シンポジウムで発表した。

(3) Naïve な手法を適用した際に現れる不安定性、特に時間刻みを小さくした際に起こる不安定性の理論解析

(2)のところで述べた、時間刻みΔtを小さくした際にあらわれる数値的な不安定性について、理論的な解析を試みた。時間刻みを１ステップ進めるプロセスを２つに分解し、その際にあらわれる２つの行列、すなわち

(a) 各基本解の特異点におく重みを求める際にあらわれる連立方程式の係数行列
(b) 一つ手前の時刻における特異点の重みが次の時刻の境界値に与える影響

について分析したところ、一つ手前の時刻の境界値の誤差が次の時刻の境界値に与える影響がΔtを小さくするにつれて大きくなり、最終的には発散することが分かった。なお、同時に、Δtを小さくするのに合わせて境界上の拘束点と各基本解の特異点の間隔を狭くすれば、発散を遅らせることが可能であることも確認できた。この結果は、2023 年 7 月に行われた金沢解析セミナーにおいて発表した。

(4) 時間刻みを小さくした際に不安定性を生じないような新たな手法の開発。特に時間離散化に対する Convolution Quadrature Method の適用

(2)および(3)の結果から、拡散および異常拡散方程式のような非定常問題に対し、naïve な手法による代用電荷法の適用は、実用には適さない、特に短時間の変化の追跡が必要な問題に対しては難しいことがわかった。したがって、naïve な手法が持つ不安定性を克服するような手法の開発が必要となった。問題点は主に時間離散化であることが(2)の結果から予想されたため、空間に関する離散化はそのままに、時間離散化について検討を行った。特に、時間に関する Volterra 型畳み込み積分方程式表現に適した離散化について様々な手法を調査した。

その結果、Lubich により提案された Convolution Quadrature Method(以下 CQM と呼ぶ) が有力な候補であることを見出した。この手法は積分方程式表現にあらわれる畳み込み積分を、逆 Laplace 変換を用いて表し、他方にあらわれるパラメータを持つ１変数線型常微分方程式の解を、常微分方程式の解法スキームとして表現する手法である。なお、CQM の他の問題への適用例としては、非定常問題に対する境界要素法がある。

CQM は常微分方程式の解法スキームとして、どのような手法を用いるかにより様々なバリエーションが考えられる。本研究課題では

(a) 線型多段階法、特に後退差分公式
(b) 陰的 Runge-Kutta 法、特に Randau ⅡA 法

を適用し、その効果について数値的に検証した。

まず、(a)の線型多段階法を適用した CQM を実装し、数値実験を行った。その結果、2 段以上の後退差分公式を利用した場合には、$O(\Delta t)$で数値解の誤差が減少することが確認できた。また、1 段から 4 段までの場合には、Δtを小さくした場合でも数値解不安定性は生じないことが確認できた。この結果は 2023 年に実施された第 28 回計算工学講演会および金沢解析セミナーで発表した。

続いて、数値解の誤差のより高次の収束を図るため、(b)の陰的 Runge-Kutta 法の適用を行っ

た。なお、陰的 Runge-Kutta 法の中でも CQM に適した方法は RandauⅡa 法および LobattoⅢa 法があるが、本研究課題では RandauⅡa 法、特に 2 段 3 次の方法を適用した。その結果、拡散方程式については、2 段 3 次である RandauⅡa 法の次数の通り、3 次の収束を得ることができた。しかし、異常拡散方程式については、時間に関する非整数階微分の階数が小さくなるにつれて収束の次数が下がることが確認された。特に 0.3 よりも微分階数が小さくなった場合には 1 次の収束しか得られなかった。これは、テストに用いた数値解が初期時刻$t = 0$において解析的でないことが原因と考えられるが、詳細の解析は現在進行中である。以上の結果は 2024 年に実施された第 29 回計算工学講演会で発表した。

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕　計2件（うち査読付論文　2件／うち国際共著　0件／うちオープンアクセス　0件）

１．著者名 Takashi Ohe, Misa Yokoyama	４．巻 37
２．論文標題 Algebraic reconstruction of a dipolar wave source from observations on several points	５．発行年 2023年
３．雑誌名 Practical Inverse Problems and Their Prospects, Mathematics for Industry	６．最初と最後の頁 247-261
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/978-981-99-2408-0_15	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

１．著者名 Takashi Ohe	４．巻 28
２．論文標題 Real-time reconstruction of moving point/dipole wave sources from boundary measurements	５．発行年 2019年
３．雑誌名 Inverse Problems in Science and Engineering	６．最初と最後の頁 1057-1102
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1080/17415977.2019.1696787	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

〔学会発表〕　計16件（うち招待講演　10件／うち国際学会　7件）

１．発表者名 大江貴司
２．発表標題 陰的Runge-Kutta 法を用いたCQMの拡散方程式に対する基本解解法への適用
３．学会等名 第29回計算工学講演会
４．発表年 2024年

１．発表者名 Takashi Ohe
２．発表標題 Direct reconstruction methods for moving sources in the wave equation,
３．学会等名 ICIAM2023（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2023年

１．発表者名 大江貴司
２．発表標題 拡散および異常拡散方程式に対する基本解近似解法におけるConvolution Quadrature Methodの適用
３．学会等名 金沢大学解析セミナー（招待講演）
４．発表年 2023年

１．発表者名 大江貴司
２．発表標題 少数の点における波動場の情報に基づく源泉項の再構成
３．学会等名 愛媛大学解析セミナー（招待講演）
４．発表年 2023年

１．発表者名 大江貴司
２．発表標題 拡散および異常拡散方程式に対する基本解解法におけるCQMの適用
３．学会等名 第28回計算工学講演会
４．発表年 2023年

１．発表者名 大江貴司
２．発表標題 少数の点における観測に基づく双極子波源の推定
３．学会等名 第12回福島応用数学研究集会（招待講演）
４．発表年 2023年

1．発表者名
Takashi Ohe, Misa Yokoyama

2．発表標題
Algebraic reconstruction of a dipolar wave source from observations on several points

3．学会等名
IMI workshop "Practical inverse problems and their prospects（招待講演）（国際学会）

4．発表年
2022年

1．発表者名
大江 貴司

2．発表標題
非整数階拡散方程式に対する時間依存基本解を用いた代用電荷法の適用

3．学会等名
日本応用数理学会環瀬戸内応用数理研究部会第25 回シンポジウム

4．発表年
2021年

1．発表者名
大江 貴司

2．発表標題
非整数階拡散方程式に対する代用電荷法の適用について

3．学会等名
日本応用数理学会2021年度年会

4．発表年
2021年

1．発表者名
Takashi Ohe, Misa Yokoyama

2．発表標題
Reconstruction of a dipole wave source from point observations

3．学会等名
The 10th Applied Inverse Problems Conference（招待講演）（国際学会）

4．発表年
2019年

１．発表者名
Takashi Ohe

２．発表標題
Direct reconstruction of time dependent moving point/dipole wave sources from boundary measurements

３．学会等名
Summer School on Applied Inverse Problems and Related Topics（招待講演）（国際学会）

４．発表年
2019年

１．発表者名
大江貴司，横山美沙

２．発表標題
数点における観測値に基づく双極子波源の代数的推定法

３．学会等名
日本応用数理学会 2019年度年会

４．発表年
2019年

１．発表者名
大江貴司，横山美沙

２．発表標題
数点における観測値に基づく双極子波源の代数的推定法とその数値実験

３．学会等名
第23回　環瀬戸内応用数理研究部会シンポジウム

４．発表年
2019年

１．発表者名
Takashi Ohe

２．発表標題
Real-time reconstruction of moving directional wave sources from boundary measurements

３．学会等名
A3 Workshop in Applied Inverse Problems（招待講演）（国際学会）

４．発表年
2019年

１．発表者名 Takashi Ohe
２．発表標題 Numerical comparison of various reconstruction formulae based on the enclosure method
３．学会等名 Inverse Problems for Partial Differential Equations at TUS（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2018年

１．発表者名 Takashi Ohe, Masaru Ikehata
２．発表標題 Comparison of two types of reconstruction formula in the enclosure method
３．学会等名 The 9th International Conference ”Inverse Problems: Modeling and Simulation”（招待講演）（国際学会）
４．発表年 2018年

〔図書〕　計1件

１．著者名 Takashi Takiguchi, Takashi Ohe, Jin Cheng, Cheng Hua (Eds)	４．発行年 2023年
２．出版社 Springer	５．総ページ数 262
３．書名 Practical Inverse Problems and Their Prospects, Mathematics for Industry 37	

〔産業財産権〕

〔その他〕

日本応用数理学会環瀬戸内応用数理研究部会 第25回シンポジウム
https://sites.google.com/view/kanseto-jsiam-2021/
(1) RIMS共同研究（公開型）「偏微分方程式における逆問題とその応用のさらなる展開」
https://www.xmath.ous.ac.jp/~ohe/RIMS_Jan2021/index_jp.html
(2) 日本応用数理学会環瀬戸内応用数理研究部会 第24回シンポジウム
https://sites.google.com/view/kanseto-jsiam-2020/

６．研究組織

	氏名 （ローマ字氏名） （研究者番号）	所属研究機関・部局・職 （機関番号）	備考
研究分担者	町田　学 (Machida Manabu) (40396916)	近畿大学・工学部・准教授 (34419)	

７．科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕　計1件

国際研究集会	開催年
RIMS Workshop on "Recent developments on inverse problems for partial differential equations and their applications"	2021年～2021年

８．本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関