

令和 5 年 5 月 24 日現在

機関番号：12601

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2019～2022

課題番号：19K23399

研究課題名（和文）微分代数方程式に対する構造保存数値解法の理論構築と発展方程式への応用

研究課題名（英文）Geometric Numerical Integration Methods for Differential-Algebraic Equations and Their Application to Evolutionary Equations

研究代表者

佐藤 峻 (Sato, Shun)

東京大学・大学院情報理工学系研究科・助教

研究者番号：40849072

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,200,000 円

研究成果の概要（和文）：構造保存数値解法の研究は常微分方程式に対してはよく発展しているものの、その一般化であり、拘束条件をもつ系のモデルとして頻りに現れる微分代数方程式に対しては、あまり研究が進展していなかった。本研究では、常微分方程式、微分代数方程式に対する構造保存数値解法の整備と、それらの偏微分方程式への応用を目指した。

この目的を基に、Scalar Auxiliary Variable 法に対する勾配流解釈、二次の保存量をもつ常微分方程式に対する高精度で陰的線形な構造保存数値解法の構成と理論解析、拘束条件をもつ偏微分方程式に対する構造保存数値解法の適用を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

微分方程式の数値解法は現代科学のさまざまな分野において重要な役割を担っている。中でも、微分方程式の構造（保存量や対称性など）を尊重した構造保存数値解法の有効性が20世紀末に認識され、今では広く利用されている。

本研究は構造保存数値解法の適用対象を広げるものであり、今後の数値シミュレーションにおいて有用であると期待される。

研究成果の概要（英文）：Structure-preserving numerical methods have been well developed for ordinary differential equations (ODEs), but they have not yet been well studied for differential-algebraic equations (DAEs), which are a generalization of ODEs and frequently appear as models of systems with constraints. This study aims at developing structure-preserving numerical methods for ODEs and DAEs, and their application to partial differential equations. Based on these objectives, we have proposed a gradient flow interpretation of the scalar auxiliary variable methods, constructed and analyzed high-order linearly implicit structure-preserving numerical methods for ODEs with quadratic invariants, and applied some structure-preserving numerical methods to a PDE with constraints.

研究分野：数値解析学

キーワード：構造保存数値解法 常微分方程式 微分代数方程式 偏微分方程式 陰的線形スキーム

1. 研究開始当初の背景

常微分方程式 (ODE: Ordinary Differential Equation) に対する汎用的な数値解法の研究は 20 世紀のうちに概ね完成し、それと同時に、汎用解法の限界も認知され、その処方箋として、20 世紀の後半頃から構造保存数値解法の研究が始まった。構造保存数値解法は、ODE に付随する構造に注目し、それらを尊重した数値解法を構成する手法であり、問題クラスを限定する代わりに汎用解法を大きく上回る性能が得られる。この大きな利点を背景に、ODE に対する構造保存数値解法は非常に精力的に研究されている。特に、Hamilton 系などの保存系 (保存量をもつ ODE) や散逸系 (散逸量をもつ ODE) に対する研究は構造保存数値解法の中心的話題であり、保存量や散逸量を担保する数値解法の適用対象は拡大されてきた。

微分代数方程式 (DAE: Differential-Algebraic Equation) は ODE の拡張であり、拘束条件をもつ。Hamilton 系の拡張である拘束条件つき Hamilton 系は DAE の代表例であり、Hamilton 系と同様に各種の構造保存数値解法が提案されている。しかし、DAE に対する構造保存数値解法の研究は、現状では概ね拘束条件つき Hamilton 系に限定されている。

一方で、偏微分方程式 (PDE: Partial Differential Equation) に対する構造保存数値解法も研究されている。特に時間独立変数 (と空間独立変数) をもつ PDE である発展方程式に対しては、「(i) 適切な空間離散化により構造を継承した ODE を構成」した上で、「(ii) ODE に対する構造保存数値解法を適用する」ことで所望の数値解法を構成する研究が行われてきた。前述のように (ii) がよく研究されているため、逆算してうまく (i) を行うことで構造保存性を担保する研究が進んできたが、PDE を空間離散化をすると DAE が現れる場合があるため、この意味でも DAE に対する構造保存数値解法の整備は急務である。

2. 研究の目的

ODE 以外の系に関しては構造保存数値解法は未だ発展途上といえ、DAE に対する構造保存数値解法の構築が次なるステップである。また、PDE を空間離散化して得られる DAE は一般に拘束条件つき Hamilton 系ではないので、DAE に対するより一般的な構造保存数値解法は、PDE の数値解法の構築にも役立つことが期待される。本研究の目的は、DAE に対する構造保存数値解法の理論の整備と PDE への応用である。

3. 研究の方法

(1) DAE に対する構造保存数値解法の整備

DAE に対する構造保存数値解法の基礎作りを行う。特に、拘束条件つき Hamilton 系以外の DAE に対しても適用可能な構造保存数値解法を構成する。

(2) ODE に対する構造保存数値解法の整備

(1) の研究において、ODE に対する構造保存数値解法の整備が必要になる可能性がある。その際は、まず、DAE の特殊ケースである ODE に対する構造保存数値解法の整備も行う。

(3) 発展方程式への応用

(1) と (2) の結果と、適切な空間離散化を組み合わせることで発展方程式へ応用する。

4. 研究成果

(1) SAV (Scalar Auxiliary Variable) 法の勾配流としての解釈: SAV 法は、微分方程式をスカラー補助変数を利用して再定式化し、その上で離散化する手法である。しかし、従来は離散化の際の指針は示されておらず、方程式ごとに各論で離散化されてきた。本研究では、再定式化後の微分方程式が勾配流とみなせることを指摘し、それによりシステマティックな離散化が可能となった。

(2) 二次保存量をもつ ODE に対する高精度陰的線形構造保存数値解法：二次の保存量は様々な保存系で自然に現れるだけでなく、上述の SAV 法などで各種の保存系を再定式化した際にも現れるため、提案手法が利用できる微分方程式は多く存在する。従来知られていた高精度な構造保存数値解法は変数の多い非線形方程式を解く必要があり、1 ステップあたりの計算量が大きくなりすぎるという欠点があったが、提案手法は線形方程式を解くだけでよく、計算量が大幅に削減されている。

(3) modified Korteweg–de Vries-sine-Gordon (mKdVsG) 方程式に対する構造保存数値解法の検討：mKdVsG 方程式は、拘束条件をもつ PDE の一例である。この mKdVsG 方程式に対し、Lagrange multiplier 法という、近年 SAV 法と関連して提案された手法を適用した。Lagrange multiplier 法はもっぱら ODE (正確には空間離散化後に ODE になる PDE) に対して適用されてきたが、mKdVsG 方程式のような空間離散化後に DAE が現れるような例においても適切な工夫を加えることで適用可能であることがわかった。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計5件（うち査読付論文 5件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Kansei Ushiyama, Shun Sato, Takayasu Matsuo	4. 巻 14
2. 論文標題 Deriving efficient optimization methods based on stable explicit numerical methods	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 JSIAM Letters	6. 最初と最後の頁 29--32
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.14495/jsiaml.14.29	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 Tomoya Kemmochi, Shun Sato	4. 巻 -
2. 論文標題 Scalar auxiliary variable approach for conservative/dissipative partial differential equations with unbounded energy functionals	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 BIT Numerical Mathematics	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s10543-021-00904-w	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 Kawai Shuto, Sato Shun, Matsuo Takayasu	4. 巻 14
2. 論文標題 Mathematical analysis of a conservative numerical scheme for the Ostrovsky equation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 JSIAM Letters	6. 最初と最後の頁 53~56
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.14495/jsiaml.14.53	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 Ushiyama Kansei, Sato Shun, Matsuo Takayasu	4. 巻 14
2. 論文標題 Essential convergence rate of ordinary differential equations appearing in optimization	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 JSIAM Letters	6. 最初と最後の頁 119~122
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.14495/jsiaml.14.119	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 Sato Shun, Miyatake Yuto, Butcher John C.	4. 巻 187
2. 論文標題 High-order linearly implicit schemes conserving quadratic invariants	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Applied Numerical Mathematics	6. 最初と最後の頁 71 ~ 88
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.apnum.2023.02.005	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計10件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 2件)

1. 発表者名 佐藤 峻
2. 発表標題 連続最適化問題に対する微分方程式の数値解法によるアプローチ
3. 学会等名 京都大学応用数学セミナー
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 佐藤峻
2. 発表標題 二次の保存量をもつ常微分方程式に対する線形かつ高精度な構造保存数値解法
3. 学会等名 数値解析セミナー
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 佐藤峻
2. 発表標題 Scalar Auxiliary Variable法と保存的exponential Runge-Kutta法の組合せによる高速かつ高精度なスキームの構成
3. 学会等名 日本応用数理学会2021年研究部会連合発表会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 佐藤 峻
2. 発表標題 混合微分を含む発展方程式に対する構造保存数値解法
3. 学会等名 高専間ネットワークによる微分方程式研究会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 佐藤 峻
2. 発表標題 保存則をもつ微分代数方程式に対する離散勾配法
3. 学会等名 RIMS共同研究（公開型）「諸科学分野を結ぶ基礎学問としての数値解析学」
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 佐藤 峻, 牛山 寛生, 松尾 宇泰
2. 発表標題 連続最適化に対する数値解析学的アプローチ
3. 学会等名 RIMS共同研究（公開型）「数値解析が拓く次世代情報社会～エッジから富岳まで～」
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Shun Sato
2. 発表標題 High-order linearly implicit schemes conserving quadratic invariants
3. 学会等名 JSPS Seminar: Topics in computational methods for stochastic and deterministic differential equations（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Shun Sato
2. 発表標題 High-order linearly implicit schemes conserving quadratic invariants
3. 学会等名 ANODE2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

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

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0件

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		
ニュージーランド	University of Auckland		