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　２ 日現在

機関番号：１４４０１
研究種目：挑戦的研究（萌芽）
研究期間：2020～2023
課題番号：２０Ｋ２０８８３
研究課題名（和文）任意多角形格子における離散部分積分とその応用としての構造保存数値解法の構成

研究課題名（英文）Discrete integration by parts on any convex polygon and design of structure-preserving numerical schemes

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）　4,700,000円

研究成果の概要（和文）：基底空間離散化とその上の微分作用素離散化条件について，凸多角形分割した上でpiecewise constant な関数空間を用いて離散ベクトル解析を構成し，多くの主要なベクトル解析則を離散的に再現およびその性質を証明するとともに，この手法が適用した構造保存数値スキームを設計できることを示し数値実験でそれを実証した．また既存の構造保存数値解法の高速化手法を上記の新しい離散化手法に適用可能であることを示し，関数解析による分析を進展させた．また，空間対称で数値安定性が高く，誤差profileを制御可能な差分演算子を新たに構成した(参照点上関数値の非線形関数として優れた性質を導入できた).

研究成果の学術的意義や社会的意義
構造保存数値解法とは微分方程式がもつ数学的性質を保存する数値解法であり，複雑さや非線形性の強い問題，超長期軌道計算が必要な問題等の分野では大変重要な数値解法である．しかし定義領域離散化手法が限定的であった．これは任意格子上での離散変分計算を行うことができなかった数学的な事情による．この状況に対しわれわれは自然な数学的拡張により任意凸多角形格子上での離散変分計算を可能とする，この困難を克服する突破口を見出した．自由格子上での数値計算は理想的だが，これまでは同時に数学的性質の多くを失うものであった．これに対し本研究はこの困難を克服し，新しい方向性を創り出せると期待したものである．

研究成果の概要（英文）：Based on the discretization of base space and differential operators, we constructed a discrete vector analysis for a piecewise constant function space on discrete convex polygons. We can discretely reproduce some primary laws of vector analysis and prove their properties. We also can design structure-preserving numerical schemes and verified this through numerical experiments.
We also investigated that applying fasten methods for existing structure-preserving numerical solutions to the new discretization method described above is possible. Our research has led to the construction of a new difference operator, a significant advancement in our field. This operator is spatially symmetric, ensuring high numerical stability, and allows for precise control of the error profile. We were able to introduce excellent properties as a nonlinear function of the function value on the reference point, a feature that has practical implications for error control in numerical analysis.

研究分野：数値解析学

キーワード：離散部分積分公式　構造保存数値解法　差分法　対数差分

様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９（共通）

１．研究開始当初の背景

本研究者はこれまでに常微分方程式・偏微分方程式に対するその変分構造に基づいた構造保存数値解法を主に直交格子や Voronoi 格子上での構成する研究を行い，多くの研究者と協働し連携をはかってきた．その一端として，2019 年にケンブリッジ大学のアイザック・ニュートン研究所での構造保存数値解法の専門家からなる研究プログラム"Geometry, compatibility and structure preservation in computational differential equations"に参加し，離散ベクトル解析や mimetic スキームの専門家等，国内ではなかなか会えない多くの専門家と直接研究交流を行った．その結果，同プログラム参加中に，本研究者は，Voronoi 格子上で成立する離散部分積分公式について，自然な数学的拡張を行うことで任意凸多角形格子で成立せしめることが可能なことを見出した．ここにそれらの公式の基となる連続な公式を二つほど例示する(ただし，後者左辺第二項の v の前にあるのは微分作用が後置形式で書かれたベクトル u の勾配場テンソルである).

$$
\begin{aligned}
\int_{\Omega}\{f\cdot\ \mathrm{div}\,\boldsymbol{v}+\ \mathrm{grad}\ f\cdot\boldsymbol{v}\}\,\mathrm{d}\Omega &= \int_{\partial\Omega}\{f\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{n}\}\,\mathrm{d}\partial\Omega,\\
\int_{\Omega}\left\{\boldsymbol{u}\cdot\ \mathrm{div}\,\boldsymbol{v}+\left(\boldsymbol{u}\otimes\overleftarrow{\nabla}\right)\boldsymbol{v}\right\}\mathrm{d}\Omega &= \int_{\partial\Omega}\{\boldsymbol{u}\,(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{v})\}\,\mathrm{d}\partial\Omega.
\end{aligned}
$$

本研究者はこうした微積分恒等式を任意凸多角形格子上で離散化したもののうち基本 6 組(上の 2 組含む)を導出・証明した．そしてそれらの反復適用でより高階な公式も導出可能である．この結果はいわば端緒であるため，これからさらなる研究によってより多くの結果を得ることができ，より自由度の高い新しい構造保存数値解法を一般に構成できるに違いないと着想した．

２．研究の目的

本研究は，任意次元での任意の凸多角形格子上での厳密な離散部分積分公式群(Gauss-Green の定理，Stokes の定理等)を構成し，厳密な離散変分計算を可能とすることで，同格子上での新しい構造保存数値解法を設計するものである．1960 年代から今まで，微分方程式の数学的構造を失わない構造保存数値解法の研究は内外で広く行われ，数値相対論，天体軌道超長期計算，冶金などの相分離現象を含む複雑な物性問題，高分子挙動計算など，広い分野で大きく貢献してきていることからもその有用性は明らかである．しかし制約も大きく，使える離散格子の種類が少ない離散化手法しか使えないことは既存の構造保存数値解法の弱点の一つである．具体的には，直交格子や，有限要素法を前提としての同一形状格子が主なもので，特殊なものとして Voronoi 格子が存在する程度である．任意多角形格子上での有限体積法等に比すると明らかに自由度が低い．
これに対し，任意凸多角形格子と対応する staggered 格子を考え，その両方の上でそれぞれ有限体積的に微分作用素を離散化することを着想し，近年，本研究者は，同格子上で離散部分積分公式を直接に計算しながら導出する新しい方法を考案し，これによって必要なだけの離散部分積分公式群を構成することに成功した．本研究はこの新しい方法をさらに発展させ，広範囲な微分方程式に対する構造保存数値解法の自由な構成を可能とし，さらにそれらの数学的解析を行うものである．また，本研究ではさらに，構造保存数値解法に関する既存の高速化法(線形多段化等)を適用することで高速数値解析との融合もさらなる目的とする．これにより，高速かつ良質な数値解を得ることが可能になると大変強く期待できる．この研究の成果・知見によって，数学的構造をもつ微分方程式数値解析の速度・精度・「質」を飛躍的に向上させ社会に貢献することが最終的な大目的である．

３．研究の方法

本研究者のこれまでの研究結果・連携実績をもとに下記のようにステップを踏んで各分野の専門家と協働してアプローチするという方法をとった．

(1) ステップ 1．
まず，目的の最初の段階である，任意凸多角形格子上での厳密な離散部分積分公式群についての研究から開始する．具体的には，離散部分積分公式群の証明の数式処理ソフトウェアによる確認と数値計算による実証，およびその過程においてこれら公式群の高精度化の可能性の探索である．紙面上での証明と異なるプロセスは論理展開の一般化や拡張可能性の発見に繋がる優れた手法で，地味ではあるが欠かせない段階である．このステップでは，Voronoi 格子上での離散部

分積分公式群の解析の知見，すなわち，本研究者のこれまでの研究成果および他研究者による離散外微分形式論が大変有用である．

(2) ステップ 2.
本研究の目的である，数学的構造を持つ微分方程式問題に対し，離散部分積分公式群によって任意凸多角形格子上の構造保存数値解法を構成する．目的の項で述べたことからわかるように，この成果は理学，工学，社会，医療問題等での実際の応用があり重要性は高い．なおこの部分に関する研究は東京大学の松尾教授と既に協働を開始しており，これをそのまま進展する予定である．

(3) ステップ 3.
さらに目的の項で述べたように，既存の構造保存数値解法高速化手法とステップ 2 で得られた構造保存数値解法の融合を行う．これにより，数値解析が大変高速化できるだけでなく，さらにその数学的性質が保たれる理想的な解法を構成することを目指す.

(4) ステップ 4.
上記のステップ 2,3 で構成した新しい構造保存数値解法，特にその数値解が持つと期待される数学的な性質の解析を推進する．一般に構造保存数値解法においては，関数解析論に基づくこうした数学的な解析過程によって，数値解の存在性や有界性など，大変優れた性質が証明できることが多々あるため,これは理論の麺からも応用の面からも大変に重要な研究プロセスであり，いわば本研究の白眉とも言える部分である．この解析過程においては
さらに格子上の離散関数解析に関する専門家との協働が重要であるため，こうした分野の専門家であり，これまでの研究において連携してきた英国バース大学の C. Budd 教授や愛媛大学の土屋教授らとの共同による研究を推進する．また，必要に応じ，本研究課題における国際ワークショップを開催する.

４．研究成果

本研究の複数年に渡る研究成果は，おおよその研究時系列に沿って以下のように示すことができる.

研究開始後，研究計画のステップ 1 およびステップ 2 において想定していた過程計画を基に各分野の専門家と協働も含めたアプローチを行った.
まず，本研究の本質的内容である構造保存を実現するために要請される離散的数学的性質についての研究を進展させるべく遂行した．具体的にはその一つである基底空間の自由度の高い離散化とその上での微分作用素の離散化に課せられる要請(Green 則，Gauss 則，Stokes 則などとその一般的な導出)について，基底空間を一般に凸多角形分割しその上に piecewise constant な関数空間を想定することと巧妙な離散ベクトル解析を考えることで既知の多くのベクトル解析則を離散的に再現することが可能であることを見出していたが，ステップ 1 に述べていたようにこれらについて数学的な本質部分を整理し，コンパクトに成果をまとめた.
また，本研究では本質的に非線形な偏微分方程式問題に対するなんらかの対応が必要であるが,このために本研究者は空間対称性を持ち，かつ，その近似誤差プロファイルを制御可能な差分演算子を新たに構成した．これは計画にはなかった全く新しい発見である．これは通常の差分演算子が参照点上の関数値の線形和の係数を Taylor 展開に基づいて半ば自動的に決定するものに対して線形和であることを放棄し参照点上関数値の非線形関数として設計することで数学的に優れた性質を導入することに成功したものである．実際，強い非線形性をもつ上に波動方程式の性質をもつために数値計算の困難を引き起こすことで知られる非粘性バーガーズ方程式に対して風上差分等の概念を導入することなく荒いメッシュで安定な計算を可能とすることを確認した.
これらの成果は日本応用数理学会年会，北陸応用数学研究集会や計算工学講演会などの研究集会・学会にて講演発表し，専門家と最新の知見を共有した.

さらにステップ 3 へも研究を推進した．いくつかある既存の構造保存数値解法の高速化手法について，たとえば非線形性が多項式の形状である場合のスキームの時間方向の多段階化と呼ばれる手法との整合性等を調べ，本質的にこれらの手法を適用可能であることを見出した．これは空間方向の離散化が変文構造をもつかぎり離散変分導関数法のフレームワークが崩れないことによるものであり，数学的には自然な拡張であることを意味する.
そして，本研究においてより優れた離散化手法として，近似誤差プロファイルを制御可能な差分演算子を新たに構成している．これは参照点上関数値の非線形関数として設計することで優れた性質を導入したものである．実際，数値計算の困難をもつ非粘性バーガーズ方程式に対して安定な計算を可能とすることを確認している．これらの成果は日本応用数理学会年会，同研究部会連合発表会，計算工学講演会などの研究集会・学会にて講演発表し，専門家と最新の知見を共有した.

さらに研究計画のステップ 4 において計画ステップ 2,3 で構成した新しい構造保存数値解法，特にその数値解が持つと期待される数学的な性質の解析を推進をテーマとし研究を進めた．新しい構造保存数値解法の数学的性質の解析に着手した．その課程において，より優れた離散化手法として近似誤差形状を制御可能な対数差分演算子を新たに構成していた．これは安定性等の側面で優れた性質をもつと期待してたが，積型誤差混入に対する抵抗性などの新たな数学的性質も発見されるに至った．これらの成果は計算工学講演会，ワークショップ「High-index saddle の探索アルゴリズムとその応用」などの研究集会・学会にて講演発表し，専門家と最新の知見共有をすすめており，一定の成果が確定した時点で論文出版する予定である．

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕　計3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 Akita Kosuke、Miyatake Yuto、Furihata Daisuke	４．巻 14
２．論文標題 Composing a surrogate observation operator for sequential data assimilation	５．発行年 2022年
３．雑誌名 JSIAM Letters	６．最初と最後の頁 123～126
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.14495/jsiaml.14.123	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 Okumura Makoto、Fukao Takeshi、Furihata Daisuke、Yoshikawa Shuji	４．巻 21
２．論文標題 A second-order accurate structure-preserving scheme for the Cahn-Hilliard equation with a dynamic boundary condition	５．発行年 2022年
３．雑誌名 Communications on Pure & Applied Analysis	６．最初と最後の頁 355～392
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.3934/cpaa.2021181	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 Okumura Makoto, Furihata Daisuke	４．巻 40
２．論文標題 A structure-preserving scheme for the Allen-Cahn equation with a dynamic boundary condition	５．発行年 2020年
３．雑誌名 Discrete & Continuous Dynamical Systems - A	６．最初と最後の頁 4927～4960
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.3934/dcds.2020206	査読の有無 無
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11件（うち招待講演　0件／うち国際学会　2件）

１．発表者名 降籏 大介
２．発表標題 非線形差分作用素の近似誤差プロファイルと入力誤差への耐性
３．学会等名 第27回計算工学講演会
４．発表年 2022年

１．発表者名 Tomoaki Miyatake, Yuto Miyatake, Daisuke Furihata
２．発表標題 A Particle Dynamics Model for Coarsening Process of Cahn-Hilliard Equation
３．学会等名 WCCM-APCOM YOKOHAMA 2022 (15th World Congress on Computation Mecchanics & 8th Asian Pacific Congress on Computation Mechanics)（国際学会）
４．発表年 2022年

１．発表者名 降籏 大介
２．発表標題 Structure-preserving algorithm, optimization problem and applications to nano-particle problems
３．学会等名 High-index saddleの探索アルゴリズムとその応用
４．発表年 2022年

１．発表者名 降籏 大介
２．発表標題 particle dynamics model による Cahn-Hilliard 方程式解の粗視化
３．学会等名 日本応用数理学会2022年年会
４．発表年 2022年

１．発表者名 Daisuke Furihata
２．発表標題 A particle dynamics model for coarsening process of phase separation phenomenon modeled by the Cahn-Hilliard Equation
３．学会等名 JSPS seminar 2022 "Topics in computational methods for stochastic and deterministic differential equations"（国際学会）
４．発表年 2022年

１．発表者名 降籏 大介
２．発表標題 非線形性をもたせた差分による微分近似
３．学会等名 第26回計算工学講演会
４．発表年 2021年

１．発表者名 降籏 大介
２．発表標題 非線形性差分とその応用
３．学会等名 日本応用数理学会年会
４．発表年 2021年

１．発表者名 降籏 大介
２．発表標題 対数差分とその応用
３．学会等名 第126回 HMMCセミナー
４．発表年 2021年

１．発表者名 降籏 大介
２．発表標題 対数差分をはじめとする非線形差分公式の解析
３．学会等名 日本応用数理学会研究部会連合発表会
４．発表年 2022年

1．発表者名 降籏 大介
2．発表標題 凸多角形格子上の積分定理とその証明
3．学会等名 日本応用数理学会年会
4．発表年 2020年

1．発表者名 降籏 大介
2．発表標題 非線形性をもたせた差分による微分近似
3．学会等名 第26回計算工学講演会
4．発表年 2021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