

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 14 日現在

機関番号：14501

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2010～2013

課題番号：22760060

研究課題名(和文)ハミルトン偏微分方程式に対する新しいエネルギー保存数値解法と離散解析力学の構築

研究課題名(英文)New energy-preserving numerical schemes for Hamiltonian PDEs and formulation of the framework as a 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・講師

研究者番号：10396822

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,100,000円、(間接経費) 930,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、ハミルトン偏微分方程式に対するエネルギー保存型数値解法を導出する新たなフレームワークを提案した。提案したフレームワークでは、エネルギー保存型数値解法は方程式を定めるラグランジアンから導出される。この方法は既存の方法と比べ、様々な対称性を用いることで他の保存量を保存する数値解法を導出できるなど、応用範囲が広い。また、このフレームワークの拘束をもつ系への拡張や、局所保存則を保った数値解法の導出法の創出、離散微分形式の理論との連携なども行った。

研究成果の概要(英文)：In this research, we proposed a new framework for deriving energy-preserving numerical schemes for Hamiltonian partial differential equations. In our framework, energy-preserving schemes are derived by using the symmetry of time translation of the Lagrangian that defines the equation. Since the symmetry used in this framework is not restricted to that of time translation, this method also derives numerical schemes that inherit other conservation laws by using the corresponding symmetries. Extension of this method to systems with holonomic constraints, local discrete conservation laws of the schemes and combination with the finite element exterior calculus were also investigated.

研究分野：工学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎・工学基礎

キーワード：数理工学 数値解析

1. 研究開始当初の背景

研究開始当初、研究代表者は非線形 Klein-Gordon 方程式に対する新しいエネルギー保存型数値解法の導出法を考案していた。それまで知られていた方法は離散勾配法や離散変分導関数法と呼ばれる方法であり、解きたい方程式をハミルトン方程式に書き直すことで適用可能となる。その意味で、既存の方法はハミルトン力学的であった。一方、研究代表者の考案した方法は方程式のラグランジュ力学的な構造を用いる。すなわち、力学の基本原理解である最小作用の原理と同様に、与えられたラグランジアンを用いて作用積分を考え、ある種の変分をとることによってエネルギー保存則を保った数値解法を導出する。そこで、本研究ではこれを様々な観点から拡張し、既存のハミルトン力学的な方法と双対をなす、ラグランジュ力学的なエネルギー保存型数値解法のフレームワークをつくることを目標とした。

2. 研究の目的

本研究の目標は、ラグランジュ力学に基づくエネルギー保存型数値解法導出法のフレームワークを新たに構築することである。また、もう一つの目標は、第一の目標が達成された後、ハミルトン力学に基づくエネルギー保存型数値解法導出法や West や Marsden らによって提案された離散力学の枠組みといった、力学理論をベースにした既存のフレームワークとの関係を調べ、構築した新しいフレームワークがその他の方法と連携することで離散力学理論として体系化できるかどうかを検討することである。

3. 研究の方法

研究期間において本研究でとったアプローチは下記のとおりである。なお、以下に示すのは大きな研究の流れであり、関連が深い研究についてはこれ以外の研究にも、適宜、取り組んだ。

- (1) 既に着想を得ていた非線形 Klein-Gordon 方程式に対するエネルギー保存型数値解法の導出法を、他の保存則や他の方程式に拡張することで、ラグランジュ力学に基づく、エネルギーにとどまらない各種の保存則を保った保存型数値解法の導出法を構築する。
- (2) 偏微分方程式のもつ保存則には、常微分方程式のときにも考えられる大域的な保存則の他に局所的な保存則が存在する。(1)で構築した新しいフレームワークを、そのような局所的な保存則を保った数値解法へと拡張する。
- (3) 「離散力学」のフレームワークとして完成させるためには、力学が想定している

様々な問題・状況を取り扱えるようになることが重要である。その代表例として、拘束をもつ系に対して本手法を拡張する。これについては、本手法だけでなく、既存の方法であるハミルトン力学に基づくエネルギー保存型数値解法のフレームワークも拡張を行う。

- (4) 発展型偏微分方程式を扱う際には時間方向の離散化だけでなく空間方向の離散化についても慎重に検討することが必要である。そこで、近年、盛んに研究されている離散微分形式の理論を本手法に組み込むことを検討する。これによって、時間方向・空間方向の両方向について幾何学的な数値解法が採用され、本手法が基礎としている幾何学的力学理論と相性の良い枠組みにすることを試みる。

4. 研究成果

以下に、本研究によって得られた主要な結果を述べる。

- (1) 当初、得られていた非線形 Klein-Gordon 方程式に対するエネルギー保存型数値解法導出法を、その他のラグランジアンをもつ常微分方程式・偏微分方程式に拡張した。また、この方法はラグランジアンのもつ対称性を用いており、Noether の定理でその対称性から存在が保証される保存則を保つように微分方程式を離散化する。すなわち、本手法はエネルギー保存則にとどまらず、他の対称性を用いて他の保存則を保った数値解法を導出することもできると思われる。本研究では、実際に、空間対称性から運動量保存則を保った数値計算法を導出することにも成功した。なお、本研究結果は国際的にも高い評価を得ており、微分方程式の数値解法に関する権威ある国際会議である SciCADE において New Talent Award を受賞した。
- (2) 偏微分方程式のもつ保存則は、(1)でターゲットとしていた大域的保存則の他に局所的保存則も存在する。局所的保存則もラグランジアン対称性由来であり、具体的には、ラグランジアン局所的な群作用による不変性から導くことができる。本研究では(1)で構築したフレームワークのアイデアを応用することで、この局所的な群作用を利用して局所保存則を保った数値解法を導出する方法論を構築した。また、そのようにして得られた局所的な離散エネルギー保存則を応用し、波動方程式に対する無反射境界条件の新たな離散化法を提案した。
- (3) 拘束条件をもつような系においても、エネルギーの保存則等が対称性から導けるという事実は変わらない。そこで、本研究で構築したフレームワークを、拘束を

もつような系に対して拡張した．具体的には，最小作用の原理をラグランジュ未定乗数を含めた形で書き直し，それに本手法を適用することで数値解法を導く．また，このアイデアは単純なハミルトン系にも適用できることを確認した．

- (4) 近年，様々な偏微分方程式を微分形式を用いて記述し，微分形式を離散化することで偏微分方程式を離散化するという方法に関する研究が盛んになっている．このように偏微分方程式を離散化すると，方程式やそれが定義されている空間の幾何学的性質を保った離散化が可能となり，非常に良い方法が導出されることが知られている．本研究で構築したフレームワークは時間方向の離散化法と言えるため，空間方向の離散化法については，特に制限がない．そのため，本手法と微分形式を離散化する方法はうまく共存できると期待される．そこで，そのような枠組みが実際に構築できることを，簡単な波動方程式などの場合について確認した．

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10件)

- (1) T.Yaguchi, A Lagrangian Approach to Deriving Energy-Preserving Numerical Schemes for the Euler-Lagrange Partial Differential Equations, M2AN, 47 (2013) 1493-1513, refereed (DOI: 10.1051/m2an/2013080).
- (2) 金澤宏紀, 松尾宇泰, 谷口隆晴, コンパクト差分に基づく離散変分導関数法, 応用数理学論文誌, 23 (2013) 203-232, 査読有.
- (3) 谷口隆晴, Lagrange 力学に基づく局所エネルギー保存型数値解法導出法と線形波動方程式に対する無反射境界条件への応用, 応用数理学論文誌, 22 (2012) 143-169, 査読有.
- (4) Y.Miyatake, T.Yaguchi and T.Matsuo, Numerical Integration of the Ostrovsky Equation Based on Its Geometric Structures, J. Comput. Phys., 231 (2012) 4542-4559, refereed (DOI:10.1016/j.jcp.2012.02.027).
- (5) T.Yaguchi, T.Matsuo and M.Sugihara, The Discrete Variational Derivative Method Based on Discrete Differential Forms, J. Comput. Phys., 231 (2012) 3963-3986, refereed (DOI:10.1016/j.jcp.2012.01.035).
- (6) H.Kanazawa, T.Matsuo and T.Yaguchi, A Conservative Compact Finite Difference Scheme for the KdV Equation, JSIAM Letters, 4 (2012) 5-8, refereed (DOI: 10.14495/jsiaml.4.5).
- (7) M.Dahlby, B.Owren and T.Yaguchi, Preserving Multiple First Integrals by Discrete Gradients, J. Phys. A, 44 (2011) 305205, refereed (DOI: 10.1088/1751-8113/44/30/305205).
- (8) Y. Miyatake, T. Yaguchi and T. Matsuo, A Multi-Symplectic Integration of the Ostrovsky Equation, JSIAM Letters, 3 (2011) 41-44, refereed (DOI: 10.14495/jsiaml.3.41).
- (9) 谷口隆晴, 松尾宇泰, 杉原正顯, ハミルトン偏微分方程式に対する解析力学的空間離散化法とその応用, 数理解析研究所講究録, 1719 (2010) 61-73, 査読無.
- (10) T. Yaguchi, Voronoi Random Field and Its Application to the Fuzzy Post Office Problem, Japan J. Indust. Appl. Math., 27 (2010) 425-441, refereed (DOI: 10.1007/s13160-010-0019-4).

[学会発表](計25件)

- (1) 谷口隆晴, 土屋卓也, 境界付き多様体上における有限要素外積解析の弱形式の適切性について, 日本数学会 2014 年度年会, 2014 年 3 月 18 日, 東京.
- (2) 芦辺健太郎, 石川歩惟, 上田怜奈, 谷口隆晴, 楽器シミュレーションに対する構造保存型数値解法の応用と関連する数理的課題, 研究集会「常微分方程式の数値解法とその周辺 2014」, 2014 年 3 月 5 日, 静岡.
- (3) 谷口隆晴, 有限要素外積解析に基づく波動型方程式に対するエネルギー保存型数値解法, 日本数学会 秋季総合分科会 応用数学分科会 特別講演, 2013 年 9 月 27 日, 愛媛.
- (4) T.Yaguchi, Lagrangian approach of the discrete gradient method based on finite element methods, the International Conference on Scientific Computation And Differential Equations 2013 (SciCADE 2013), 16th Sep., 2013, Spain.
- (5) 谷口隆晴, シンプレクティック数値積分法における修正ハミルトニアン存在定理について, 日本応用数理学会 2013 年度年会, 2013 年 9 月 11 日, 福岡.
- (6) 北祐樹, 谷口隆晴, ホロノーム拘束をもつハミルトン系に対する離散勾配法, 日本応用数理学会 2013 年度年会, 2013 年 9 月 10 日, 福岡.
- (7) 谷口隆晴, シンプレクティックフローとしてのシンプレクティック数値積分法, ワークショップ「有限体積分法の数学的基盤理論の確立 III」, 2013 年 8 月 3 日, 愛媛.
- (8) T.Yaguchi, On the finite element exterior calculus for parabolic equations, 2013 Tokyo Workshop on Structure-Preserving Methods, Japan,

- 8th Jan., 2013.
- (9) 谷口隆晴, 放物型方程式に対する有限要素外積解析の誤差評価について, 応用数学合同研究集会, 2012 年 12 月 22 日, 瀬田.
- (10) T.Yaguchi, Application of the Lagrangian Approach of the Discrete Gradient Method to Scleronomic Holonomic Systems, 10th International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics (ICNAAM 2012), 21st Sep., 2012, Greece.
- (11) 谷口隆晴, ホロノミック系に対するラグランジュ力学的離散勾配法, 日本応用数学会 2012 年度年会, 2012 年 8 月 30 日, 北海道.
- (12) T.Yaguchi, A Lagrangian Approach to Deriving Local-Energy-Preserving Numerical Schemes for the Euler-Lagrange Partial Differential Equations, 15th International Congress on Computational and Applied Mathematics, Belgium, 12th Jul., 2012.
- (13) 若林岳人, 谷口隆晴, 山本有作, Newton 法の Parareal Algorithm による並列化, 常微分方程式の数値解法とその周辺 2012 年 3 月 16 日, 静岡.
- (14) 谷口隆晴, Euler-Lagrange 偏微分方程式に対する局所エネルギー保存スキーム導出法, 日本応用数学会研究部会連合発表会, 2012 年 3 月 9 日, 福岡.
- (15) C.Budd, T.Yaguchi and D.Furihata, Backward Error Analysis of the Scheme for the KdV Equation by the Discrete Variational Derivative Method, 2012 Tokyo Workshop on Structure-Preserving Methods, 16th Jan., 2012, Japan.
- (16) C.Budd, 谷口隆晴, 降旗大介, KdV 方程式に対するある半離散スキームの後退誤差解析, 応用数学合同研究集会, 2011 年 12 月 17 日, 滋賀.
- (17) 新堂敬隆, 谷口隆晴, 山本有作, 時間依存固有値問題の数値解法に関する基礎検討, 日本応用数学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会第 12 回研究会, 2011 年 11 月 21 日, 東京.
- (18) C.Budd, 谷口隆晴, 降旗大介, ある半離散スキームによるソリトンのシミュレーションについて, RIMS 研究集会「科学技術計算における理論と応用の新展開」, 2011 年 10 月 26 日, 京都.
- (19) 谷口隆晴, 変分構造をもつ楕円型方程式に対する離散勾配法の応用, 日本応用数学会 2011 年度年会, 2011 年 9 月 16 日, 京都.
- (20) T.Yaguchi, A Lagrangian Approach to Deriving Energy-Preserving Numerical Schemes for the Euler-Lagrange Partial Differential Equations and

Its Applications, the International Conference on Scientific Computation And Differential Equations 2011, 12th Jul., 2011, Canada.

- (21) T.Yaguchi, T.Matsuo and M.Sugihara, The Discrete Variational Derivative Method Based on Discrete Differential Forms, International Workshop on Numerical Linear Algebra and Its Applications, 2nd Jul., 2011, China.
- (22) C.Budd and T.Yaguchi, On the Backward Error Analysis of the Discrete Variational Derivative Method, 2011 Tokyo Workshop on Structure-Preserving Methods, 21st Feb., 2011, 東京.
- (23) T.Yaguchi, T.Matsuo and M.Sugihara, A Lagrangian Approach to Deriving Energy Preserving Numerical Schemes for the Euler-Lagrange PDEs, Tasmanian Rigorous Analysis and Geometric Integration Conference, 15th Dec., 2010, Australia.
- (24) 谷口隆晴, 松尾宇泰, 杉原正顯, ラグランジュ力学に基づくエネルギー保存型数値解法導出法, RIMS 研究集会「科学技術計算アルゴリズムの数理的基盤と展開」, 2010 年 10 月 20 日, 京都.
- (25) T.Yaguchi, T.Matsuo and M.Sugihara: Extension of the Discrete Variational Derivative Method to General Meshes Based on Discrete Exterior Calculus, BIT50 Trends in Numerical Computing, 18th Jun., 2010, Sweden.

6. 研究組織

(1) 研究代表者

谷口 隆晴 (YAGUCHI, Takaharu)
神戸大学・大学院システム情報学研究科・講師

研究者番号: 10396822