様　式　C－19、F－19、Z－19　(共通)

科研費 KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 26 年　6 月　7 日現在

機関番号：14401
研究種目：挑戦的萌芽研究
研究期間：2011～2013
課題番号：23656070

研究課題名（和文）非構造化メッシュ上のボロノイ格子差分による構造保存数値解法

研究課題名（英文）Structure preserving methods based on finite difference methods with unstructured Voronoi meshes

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、（間接経費）　840,000円

研究成果の概要（和文）：有限領域のVoronoi格子分割について境界補間などについて一次近似と高次近似の特徴を評価するとともに,非対称性格子上の作用素について補間誤差理論を用いた誤差評価を試みた．また,Cahn--Hilliard方程式などの偏微分方程式に適用し理論予測通りであることを確認した．さらに,計算量の大きい非対称数値スキームに対し,離散変分の定義を緩和して予測子修正子法を適用し数値スキームの弱非線形化を行った．これにより,強い非線形性問題に対し緩和構造保存性を保つほぼ線形な高速数値スキームを得た.
また,国際研究集会SciCADEにて招待講演を行うなど多くの国際研究集会に参加・講演等を行った.

研究成果の概要（英文）：We have evaluated some mathematical features of finite difference operators with various error orders based on some Voronoi meshes in bounded domains and have studied error evaluations of them on nonsymmetric meshes. We also applied our methods to concrete partial differential equations, such as the Cahn-Hilliard equation, and obtained results that confirm our estimations. To decrease computation cost for those compromised numerical schemes, moreover, we have developed fast schemes based on predictor-corrector method with relaxed discrete variational derivative method and this attempt was a quite success. We have also attended and given talks on some international conferences in this three years, for example, we gave a invited talk at the SciCADE 2011.

研究分野：工学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎

キーワード：数値解析　偏微分方程式　非構造メッシュ　構造保存数値解法　離散変分導関数法　ボロノイ格子

１．研究開始当初の背景

当研究計画申請時までにおいて、申請者は偏微分方程式に対する構造保存解法として離散変分導関数法を構築した[2]. これは大域構造が変分原理を介して Gauss--Green 則(以下 GG 則)などの局所則に繋がることを利用して，大域構造側から変分原理を順に離散化することで数値解法において大域構造を再現する方法論である.

しかし，離散化に差分法を用いると原理的な問題が生ずる．それは，大域構造を満たすための問題領域形状に適合した格子，すなわち任意格子上の差分は GG 則を満たさないことである. 逆に直交格子上の差分は GG 則を満たすが，任意形状には適合せずやはり大域構造を再現できない.

これに対し, 申請者は GG 則の成立には離散領域境界と格子点間ベクトルが直交していることが十分条件であることをグラフ理論より発見し，Voronoi 格子がその条件を満たすことを見出していた[1]. これは Voronoi 格子差分により任意形状領域問題に対し構造保存解法の構築が可能であることを示唆する.

これが研究申請・開始当初の学術的背景であり、本申請者は Voronoi 格子差分に注力した研究を行うことでこの可能性を追求するべきであると考えた.

引用文献(研究計画開始当初)

[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).

２．研究の目的

(1) 概要

偏微分方程式の数値解法として主力的なものでる差分法は原則的に直交座標を基盤とする．これに対し、任意格子上の Voronoi 差分の利用を提案することで領域形状の自由度を与えることが第一の目的である.

そして，Voronoi 差分を使った構造保存解法によって，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二の目的である.

(2) 研究期間内の具体的な目的・目標

Voronoi 格子上で GG 則は成り立つが構造保存解法にはこれだけでは不足で， 異なる微分階数に対応するより一般的な局所則の成立と無矛盾な変分原理の離散化が必要である．そこでこの二点を実現することが研究の第一の目標である.

また，有限要素法の形状自由度の理論的な補償として補間誤差を評価する Cea の補題があるが，Voronoi 格子上の差分法においても実用上，類似の数学的評価が必要である．そこでこうした評価を与えることを第二の目標とする.

また，上記二目標が達せられれば離散変分導関数法を適用することで Cahn-Hilliard 方程式や非線型 Schroedinger 方程式などの困難な問題に構造保存解法を与えることが可能である．よって，こうした問題に実用的な解法を供することを第三の目標とする.

(3) 本研究目的の学術的な特色,予想される結果・意義

学術的特色は大きく二点ある．一点目は，直交格子や射影法を用いずに自由に格子点を配置できる Voronoi 格子に着目して差分法を適用する点である．二点目は，Voronoi 格子差分による GG 則が成り立つ点に着目して離散変分導関数法を適用する点である.

そして，本研究の結果及び意義としては，上の特色と第二の目標の内容を受け継ぐもので，一点目は差分法の格子点を直交格子の射影などではなく真に自由に配置できるようになることである．二点目は，構造保存解法を適用できることにり問題の大域的性質が離散的に再現されることである．この再現性により近似精度や安定性の点で良好な結果が強く期待できる．そしてこの研究により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した.

３．研究の方法

(1) 概要

研究の方法は研究開始当初にたてられた研究計画におおまかに沿う形で構成された．具体的には, 初年度に Voronoi 格子の数学的性質の調査と Voronoi 格子上の差分に成り立つ局所則の探求を行ない，この得られた結果を用いて計画年度の二年度目以降に Voronoi 格子上差分を用いての構造保存解法フレームワーク(離散変分導関数法)の構築のための研究を行という形である.

(2) 研究方法の要旨

本研究を達成する第一の方法は，Voronoi 格子上の離散 GG 則そのものを詳細に調査するとともに Voronoi 格子上に成立する類似の

局所則を探求することである．一般的な混合格子と異なり Voronoi 格子には格子点間ベクトルと領域境界が直交する優れた性質があるため，この過程において複数の重要な局所則が見つかることが強く期待される．また実用上は空間異方性も重要であるので，異方性には特に配慮して研究をすすめた．この際、Voronoi 差分ならびに局所則は該当する連続版数学的概念と比べると精度は一次ないしは二次程度と推測される.しかし近似精度の高さも実用上重要であるため，出来る限り近似精度の高い離散化，局所則を見出すことも本方法に含められた.

第二の方法は，有限要素法の自由度を補完する存在である Cea の補題などの強力な数学的基盤に対し，Voronoi 格子上の差分法においても類似の数学的性質を見い出すことを目的としての研究である．これは第一のものに比して困難であるが，達成された場合の数学的意義が大きい.

第三の方法は構造保存解法である離散変分導関数法と Voronoi 差分を組み合わせ，Cahn-Hilliard 方程式や非線型 Schroedinger 方程式，Gross-Pitaevskii 方程式などの数値求解が困難な問題に「使える」差分スキームを構成することで実際の数学的性質を調べるものである．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，この方法は理論の進展の面からみても欠かせない.

(3) 時系列に沿った具体的な方法:前半

研究前半では要旨の項で述べた最初二つの方法を主にすすめる．つまり，Voronoi 格子上における数学的性質そのものの調査・研究と，格子形状と微積分誤差等の関係を与える数学的理論の模索である．まず Voronoi 格子上で成立する離散 GG 則の数学的性質の数学的な評価と定式化を行う．離散化に任意の自由度があり無矛盾な体系を作ることが難しいため慎重な論理展開が必要である．また，Voronoi 格子上に成り立つ数学的性質について GG 則評価をはじめ有用な知見が既存文献等に存在する可能性があるため，文献調査および研究交流による十分な背景調査が必要と考える.

また，これまでの予備研究などから Voronoi 格子上で成立する他の局所則があると予想されるため，ノルム評価の数値実験などを介してこの探求を行う.この未知の局所則については，人工従属変数を導入する一般混合格子法の研究に示唆となる知見が含まれる可能性が高いため，これも文献の調査を丹念に行なう.

また要旨にも述べたように，通常の議論で得られる Voronoi 差分およびその局所則は該当する連続版のそれと比べての近似精度があまり高くなく，おそらく１次オーダーであると予想される．そこでこの近似精度の低さを解消するために高次 Voronoi 差分の可能性を検討し，同様の局所則を探し出すことを次の研究方法とする.

単純に高次化するだけではなく次数を任意に上げる一般化を見据えて理論展開をおこないたい．この目的が達成された場合，Voronoi 格子上での差分法による離散スペクトル法の構築が可能となり，格子形状の自由度と精度の高さを同時に得られることになる.

要旨にある第二の方法も前半から開始する．まず，多角形要素上スプライン補間に基づく Cea の補題について，Voronoi 格子上でどのように対応付けることが可能か，注意深く研究を行う.近年，多角形上の関数補間についての様々なノルム評価式の上限評価式がコンピュータ援用により画期的に改善されている状況があるため，こうした結果と手法の適用により従来の純粋な関数解析的評価と異なる優れた評価を得られる可能性がある.

(4) 時系列に沿った具体的な方法:後半

後半では要旨の項で述べた後半二つの研究方法を主に適用する．第三の方法にはそれまで研究成果と離散変分導関数法の慎重な結合を要する.離散変分導関数法については(研究目的項記載の)[2]にて広範囲な研究を行っているが，自由格子上での差分法実装は未知の部分が多く実装には多くの困難が予想された．これらを丁寧に解決し，多くの偏微分方程式問題に対して離散変分導関数法による数値解法を提供するとともに数学的な性能評価を行い，ユーザーに利益を与えることを考える.

具体的には，求解が困難な例の Cahn-Hilliard 方程式と保存系の例である非線型 Schroedinger 方程式などを対象として研究結果を適用し，Voronoi 格子上で大域散逸性,保存性を再現する差分スキームを構成，得られた差分解法の計算量および誤差の評価，および数値計算結果による数値評価を試みる．また，既存数値解法との比較を行い，離散変分導関数法による優位性を評価する.

次に，一部完成している離散関数解析の結果を用いての Voronoi 格子差分による数値解法の理論的評価を試みる．離散関数解析はまだ体系付けられた学問ではないため適用には困難があるが，関数補間と弱形式を通じて関数解析を理論基盤にもつ有限要素法が数学的に豊かな応用をみせているように，Voronoi 差分と離散変分導関数法も同様の数学的な結果を持てる可能性がある．困難ではあるがこの可能性を探求することは重要で

ある．

４．研究成果

(1) 研究初年度における研究成果
　Voronoi 格子上における数学的性質そのものの調査・研究と，格子形状と微積分誤差等の関係を与える数学的理論の模索を行った．
まず Voronoi 格子上で成立する離散 Gauss--Green 則(以下 GG 則)の数学的性質の数学的な評価と定式化のために有限領域の Voronoi 格子分割について特に境界補間の処理について調査検討を行い，一次近似と高次近似の特徴を評価した．一般に空間補間精度よりも境界補間精度を上げておくと数値解の精度が良いことが経験的にもよく知られているため，この評価は実用的である．

　また，Voronoi 格子上に成り立つ数学的性質について GG 則評価をはじめ有用な知見が既存文献等に存在する可能性を考慮し文献調査を
行い，Hodge 作用素の離散化についての研究に関係がある示唆を見出した．外微分形式との関連性は以前より推測されており，この示唆は今後の発展に寄与する可能性が高い．

　また，予定通り，構造保存解法に対する研究交流のために値解法の専門家が集まる研究集会 SciCADE(International Conference on SCIentific Computation And Differential Equations) にて招待講演を行い他専門家との討論を行った．同様に 2000 名以上の応用数学研究者が集まる ICIAM(International Congress on Industrial and Applied Mathematics)でも講演を行い，Voronoi 格子上での計算
における議論を行った

(2) 研究二年度における研究成果
　前年度に引き続き，Voronoi 格子上で成立する微積分則に相当する数学的性質についての調査および研究を行なった．また，対称性が無い状態での格子形状と微積分誤差等の関係について，Cea の補題に相当する数学的な性質を記述する方法の模索も継続している．これに加え，構造保存解法である離散変分導関数法と Voronoi 差分を組み合わせることにも取り組んだ．

まず，最初の項目としては Voronoi 格子上の離散 GG 則の数学的性質の数学的な評価と定式化のために有限領域の Voronoi 格子分割について特に境界補間の処理について調査検討を続け，特に高次近似の特徴の評価についてさらなる考察を加えた．これについては，理論的な可能性と実用性に隔たりがあり，さらなる今後の研究が必要であることが認識される．境界次元は１次元低いため，内部補間精度よりも境界補間精度を上げるというような用法であればこの考察はまだ比較的実用的である．また，Hodge 作用素の離散化との関連性についても研究を続けている．外微分形式による形式的離散化を進める方法と微分幾何学を離散化する方法との両立は困難であるため，これからの研究としては前者を中心にするべきと考えられる．

また，微分方程式の数値解析や構造保存解法に対する研究交流のために専門家が集まる国際研究集会 ICCAM (International Congresson Computational and Applied Mathematics) や ICNAAM (International conference of numerical analysis and applied mathematics) などに参加，講演発表し他専門家との討論を行った．

(3) 研究最終年度における研究成果
　それまでの研究結果を踏まえ，前年度に引き続いて Voronoi 格子上の微積分則の数学的性質について研究を行なった．まず，初年度，二年度の研究成果と離散変分導関数法の慎重な結合を行った． これは，Voronoi 格子上の離散 Gauss--Green 則の数学的評価と境界補間の処理法をもとに実際に偏微分方程式に適用を試みた数値計算により，成果が肯定的に評価されることになった．ただし，空間次元が高い場合の処理の煩雑さは今後の課題であり，ソフトウェアによる自動化や，より簡潔な数学的処理方法が必要である．

次に，こうした煩雑な処理を経て構成された数値スキームは原理的に計算量が大きく実用性を下げるため，これを克服すべく，離散変分導関数法の理論的な枠組みを数学的に緩和する形で，予測子-修正子法の概念に基づいて数値スキームの弱非線形化を試みた．この試みは驚くほど成功し，数値実験において，強い非線形性を持つ問題に対して構造保存性を保ちつつ，ほぼ線形スキームの計算速度が得られた．この成果はこれからより発展が強く見込まれる大きなものである．

　また，微分方程式の数値計算分野における応用数学者のほぼ大半が集まる国際研究集会 SciCADE (International Conference on Scientific Computation and Differential Equations) や，非線形波動方程式と現象の国際研究集会 NonlinearWave2013 (The Third International Conference: Nonlinear Waves)，微分方程式におけるヨーロッパ国際研究集会 Equadiff13，同メンバーと日本人研究者に依る国際研究集会 CJS2013 などに参加，講演発表を行ない，他専門家との研究成果の交換等を行った．

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　3 件）

① Yuto Miyatake, Takayasu Matsuo and Daisuke Furihata, Conservative finite difference schemes for the modified Camassa-Holm equation, JSIAM Letters, 3 (2011), pp.37-40.

② Yuro Miyatake, Takayasu Matsuo and Daisuke Furihata, Invariants-preserving integration of the modified Camassa-Holm equation, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 28(2011), pp.351-381.

③ Takayasu Matsuo, and Daisuke Furihata, A stabilization of multistep linearly implicit schemes for dissipative systems, J. Comput. Appl. Math., {¥bf 264}(2014), pp. 38-48, DOI: 10.1016/j.cam.2013.12.028

〔学会発表〕（計 8 件）

① Daisuke Furihata, Discrete Variational Derivative Method -one of structure preserving methods for PDEs-, International Conference on Scientific Computation and Differential Equations (SciCADE), Tronto, Canada, invited plenary talk, July, 2011, (**招待講演**).

② Daisuke Furihata, An introduction to structure preserving methods through the discrete variational derivative method, Chinese Academy of Sciences Conference, invited talk, Nov., 2011, (**招待講演**).

③Daisuke Furihata, Discrete Variational Derivative Method on Voronoi Mesh, International Congress on Industrial and Applied Mathematics, Vancouver, Canada (2011 July).

④ Daisuke Furihata, Takayasu Matsuo, Weakly nonlinear structure preserving schemes for strongly nonlinear partial differential equations, International Congress on Computational and Applied Mathematics (ICCAM 2012), Gent, Belgium (2012 July).

⑤Daisuke Furihata, A new technique to design numerical schemes with weak nonlinearity based on discrete variational derivative method, International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics, Kos, Greece, (2012 Sep.).

⑥Daisuke Furihata, An attempt to design a fast and structure preserving scheme for the Feng equation, The Third International Conference: Nonlinear Waves -Theory and Applications, Beijing, China (2013 June).

⑦Daisuke Furihata, An attempt to create fast numerical schemes with the discrete variational derivative method, Equadiff13, Prague, Czecho (2013 Aug.),

⑧ Daisuke Furihata, Predictor corrector algorithm with the discrete variational derivative method, International Conference on Scientific Computation and Differential Equations, Valladolid, Spain (2013 Sep.).

〔図書〕（計 1 件）

章「常微分方程式の数値解法」 pp.398--401, 応用数理ハンドブック,日本応用数理学会監修，朝倉書店，2013.

〔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