

数値計算における「構造保存」の考え方について

東京大学 大学院 情報理工学系研究科 松尾宇泰¹

Takayasu Matsuo

Graduate School of Information Science and Technology

The University of Tokyo

本稿は、(主に微分方程式に対する)「構造保存数値解法」に関する、著者なりの案内である。著者自身による既存のサーベイ [15] と重なりがかなりあるが、その後の学問状況の進展にも若干触れる。

1 微分方程式の汎用解法と「構造保存数値解法」

本稿で考察するのは、主に微分方程式の数値解法である。現代科学・工学の諸問題が解析的に解けない微分方程式として数理モデリングされる以上、微分方程式の数値解法が現代科学・工学の根底を支える主要技術のひとつであることは、最早異論はないであろう。この観点から、微分方程式の数値解法は計算機の黎明期から盛んに研究されてきた。しかしこの研究の歴史は、ある時期に一度転換期を迎えたように思われる。歴史の前半は、主に「汎用解法」、すなわち対象を限定せず成立する一般論の確立に焦点が当たっていた。例えば常微分方程式の数値解法で言えば、基礎的な Euler 法や Runge-Kutta 法がこれにあたり、この類の研究は 1990 年代に Hairer らによる教科書が出版された時期にある程度の成熟に達したと言ってよい [9, 10]。一方、汎用解法は成熟するにつれその限界も明らかになり、歴史の後半では、対象とする問題のクラスを限定する代わりに、汎用解法を超える性能を持つ特殊な数値解法が脚光をあびることになる。1980 年代に急激に研究が進展した、Hamilton 系に対する symplectic 数値解法がその端緒であり、いまでは様々なものが知られている。いずれも、問題の何らかの数理構造を保存することが鍵になるため、総称して「構造保存数値解法」と呼ばれている (→ [2, 6, 8, 14, 15] など)。

イメージを掴みやすくするために、簡単な例を挙げておく。次のような、変数 $q(t), p(t)$ に関する常微分方程式を考えよう。

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p \\ -\sin q \end{pmatrix} = J \nabla H, \quad J = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad H(q, p) = \frac{p^2}{2} - \cos q. \quad (1)$$

最初の等号が問題を定義しており、これは一階の連立常微分方程式である。適当な初期値を与えて Runge-Kutta 法などを使えば、数値解は求まる。これが「汎用解法」の考え方である。ところで、実はこの方程式は力学系の振り子問題を記述しており、そのような物理的背景から解はいくつかの特徴を備えている。例えば力学的エネルギー (Hamiltonian) $H(q, p)$ は時間によらず一定である。しかしながら Runge-Kutta 法を普通に用いたのでは、解はある程度高精度であるとはいえ、エネルギーの保存性は失われるであろう。短時間の積分ならば問題はないが、天体のシミュレーションのように長時間の挙動を観察したいとき、エネルギーが保存しないのではその結果を信じることはできない。この観点からは、この問題は第二の等号の右辺のように、やや抽象的に書く方がよい。この形は、この問題が歪対称行列 (symplectic 行列) J で特徴付けられる勾配流 (∇ は通常の $\mathbb{R}^2$ の勾配) であることを表しており、エネルギー保存性はこのことの直接の帰結である。実際、 $z = (q, p)^\top$ として、

$$\frac{d}{dt} H(z(t)) = \nabla H \cdot \dot{z}_t = \nabla H \cdot J \nabla H = 0 \quad (2)$$

である。ならば、この問題を物理的に妥当に、すなわちエネルギーを保存するように解くには、第一の等号が示す方程式の具体形を直接離散化するよりは、第二の等号が示す勾配流の構造を離散化の方が近道であろう。実際にこれは広いクラスの問題に対して実現でき、現在では離散勾配法と呼ばれている。

このような構造保存数値解法は汎用解法より「優れて」いるが、これは問題の知識をより多く使っている、ある意味では当たり前のことである。問題はそのバランスであって、知識をうまく使えずに汎用解法と変わらない解法と、知識を使いすぎてほとんど特定の解しか扱えない解法との間にある、バランス

¹matsuo@mist.i.u-tokyo.ac.jp

のとれた何かをどう括り出すか、構造保存数値解法の成否の肝はそこにあると言ってよい。学問としては、実際の応用分野（電子状態計算、非線形光学、パターン形成、…）とそれを支える数理科学（微積分、関数解析、微分幾何、…）を、現象の単なる微分方程式化を超えてどう対話させるかが肝である。

2 構造保存数値解法の例

最近、この話題のサーベイ・教科書がかなり充実しているため（前述のリストを参照）、詳細はそれらに譲りたい。ここでは、研究会の講演の補完情報として、そこで触れたいいくつかの手法についてごく簡単にその原理と最近の話題を紹介する。

2.1 離散勾配法

すでに述べたように、離散勾配法（discrete gradient method）の要点は、式 (1) のような勾配系、およびその帰結としての保存性 (2) を、離散系でも再現することである。

以下を満たす写像 $\nabla_d : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ （ d は系の次元、すなわち、 $z \in \mathbb{R}^d$ ）を「離散勾配」と呼ぶ。任意の $H : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ 、任意の $z, \tilde{z} \in \mathbb{R}^d$ に対して、

1. $H(\tilde{z}) - H(z) = \nabla_d H \cdot (\tilde{z} - z)$;
2. $\nabla_d H(z, z) = \nabla H(z)$.

このとき、差分スキーム

$$\frac{z^{(m+1)} - z^{(m)}}{\Delta t} = J \nabla_d H(z^{(m+1)}, z^{(m)}) \quad (3)$$

は、保存性

$$\frac{H(z^{(m+1)}) - H(z^{(m)})}{\Delta t} = \nabla_d H(z^{(m+1)}, z^{(m)}) \cdot \left(\frac{z^{(m+1)} - z^{(m)}}{\Delta t} \right) = \nabla_d H \cdot J \nabla_d H = 0$$

を満たす。ただし、 $z^{(m)} \simeq z(m\Delta t)$ は、固定時間刻み幅 Δt で離散化した際の近似解である。スキーム (3) は、連続版の勾配流構造を真似て、離散的な勾配流を定義しており、上の保存性は（連続版と全く同様に）その自然な帰結として得られる。これが構造保存数値解法の典型的な例である。連続版にせよ離散版にせよ、保存性は、関数 $H(z)$ の具体形に依らない点に注意しよう。離散版では、上の条件を満たす離散勾配 $\nabla_d H$ をどのように発見するかが肝要であるが、これにはいくつかの方法が知られている。近年は、理論的取り扱いがしやすい averaged vector field 法がよく用いられる [21]。

離散勾配法は単純な手法であるが、単なる射影法 ([8, IV.4] を参照) よりも優れた性能を示すことが多い。このことは様々な観点から研究されている（例えば本講義録 [17] を参照）。複数の保存量を狙うスキームも形式的には書き下せる [20]。ただしスキームがどのような時間刻み Δt に対して可解であるかは自明でなく、一般には保存量の追加に伴い苦しくなる。離散勾配法は、素朴には上述のような用途のため開発されたものだが、近年はその幾何学的一般化とその応用も研究されている ([13] など)。

最後に、著者自身を含むグループの（本稿執筆時点での）最新の成果として、離散勾配法によるスキームの線形化と漸近挙動の話題を挙げておく。上では具体形を一切示していないが、非線型な問題に対して、離散勾配は一般に非線型な関数となり、従って、スキーム (3) は（連立）非線型方程式となる。計算量削減のため、厳密な保存性を諦めて（緩和して）線形なスキームを構成する方法も知られているが [4, 6]、緩和に自由度があり、その選択によりスキームの安定性は大きく変化する。この現象の理解は、最近著者自身により始められたばかりで [16]、「安定な線形化を選択する指導原理」は、実用上切望されるものの大きな未解決問題である。

やや話題はずれるが、この類の研究の難しさを、力学系理論の観点から少し説明しよう。上では保存系（Hamilton 系）の例を挙げたが、作用素 J を半負定値な作用素 A に取り替えれば、系は散逸系となる： $(d/dt)H = \nabla H \cdot A \nabla H \leq 0$ 。離散勾配法によれば、この系に対して散逸的なスキームを構成できる。さて、

保存・散逸どちらの場合も系は勾配流系であり、連続の場合は力学系理論の観点から様々なことが分かっている。例えば散逸系では、適切な条件下で関数 H は Lyapunov 関数として機能し、系の安定な漸近挙動（不動点への漸近）を支配する。これを「構造保存的に」離散化した場合、同様の漸近挙動を自然に期待したくなる。時間刻み幅 Δt を固定した場合、系は離散力学系（力学系理論における）となり、Lyapunov 理論が確立されている [12]。時間刻み幅を可変にしても、Lyapunov 理論の肝は「Lyapunov 関数の減少に伴い解が底点へと追いつまれていくこと」であるから、同様の理論が成立しそうであるが（離散勾配スキーム (3) の保存・散逸性は時間方向に局所的な性質であり、刻み幅 Δt を変化させても失われないことに注意）、これは存外難しく、意外なことに著者らによる最近の研究 Sato–Matsuo–Suzuki–Furihata [22] まで類似の結果は知られていなかった。困難の本質は、Lyapunov 理論の構成において基本的な、時間発展写像（フロー）の半群性の喪失にある。連続力学系の時間発展写像を $\phi_{\Delta t} : z(t) \mapsto z(t + \Delta t)$ と書くとき、これは半群的である： $\phi_{\Delta t_1} \phi_{\Delta t_2} = \phi_{\Delta t_1 + \Delta t_2}$ 。この性質は、当然ながら数値解法（近似解法）では成り立たない。差分スキームを、写像 $F_{\Delta t} : z^{(m)} \mapsto z^{(m+1)}$ を定義するものと考えたとき、一般には $F_{\Delta t_1} F_{\Delta t_2} \neq F_{\Delta t_1 + \Delta t_2}$ である（こんな式が任意の $\Delta t_1, \Delta t_2$ に対して成立してしまったら、刻み幅は意味を持たなくなる！当たり前を観察だが、このことが明示的に述べられたことは案外少ないように思う）。ゆえに、通常の手順の Lyapunov 理論の構成は不可能になる。上述の Sato らの結果は、Lyapunov 理論において基本的と思われていた写像の半群性を取り除いても、（手前味噌ではあるが）巧妙な手順で、ぎりぎり Lyapunov 理論と同様の強さの定理が成立することを示したものである。そこでは「非半群的力学系」（nonsemigroup dynamical systems）という新しい力学系を提案している。このことは力学系理論の分野でも興味深いのではないかと考えている。なお、上で、時間刻み幅を固定にした場合、 $F_{\Delta t} F_{\Delta t} = F_{2\Delta t}$ の意味での半群性は成り立たないが、 $T = F_{\Delta t}$ とおいて、 $T^n T^m = T^{n+m}$ （ n, m は非負整数）の意味での、つまり離散力学系としての半群性が成り立つ。前述の [12] はこの場合の結果である。

2.2 離散変分導関数法

離散勾配法は常微分方程式系を対象とするが、偏微分方程式、例えば次の形の方程式などに対しては、類似の「離散変分導関数法」がある [6, 7]。

$$u_t = -\frac{\delta H}{\delta u}. \quad (4)$$

ここで $H(u, u_x, \dots)$ は解 $u(t, x)$ に依存した汎関数であり、右辺は H の u に関する変分導関数である。この系は適切な境界条件下で散逸的になる。例えば拡散方程式や、相分離を記述する Cahn–Hilliard 方程式がこのクラスに属している。

離散変分導関数法の記述には複雑な記法の導入が必要になるため、ここでは踏み込まず、本稿著者らによる書籍に譲る [6]。以下、甚だ不完全ではあるが、離散勾配法との関係の観点から要点のみ説明する。

まず最初の観察として、変分導関数は無限次元関数空間における勾配であることに注意しよう。この観点からは、偏微分方程式 (4) は無限次元の場合の勾配流系であり、それに対する離散勾配法を（空間方向を連続とした、すなわち無限次元の関数空間のまま）考えられる。ここで、その離散的勾配流構造を壊さないように適切に空間方向を離散化したものが離散変分導関数法である。このとき、もともと無限次元空間であったこと（および勾配を生成する汎関数 H に一般に微分作用素が含まれること）に由来して、空間方向の部分積分（に相当する部分積分）操作が発生する。あるいは、逆に (4) 型の方程式に対して、まず先に空間方向を適切に離散化して有限次元の勾配流系に落とし、それに対して通常の（有限次元版の）離散勾配法を使うと考えてもよい。この場合、汎関数 H の中の微分作用素を適宜差分作用素に置き換えて空間方向を離散化し、それに対して通常の勾配を考えれば自然に部分積分操作も行われることが知られている [3, 15]。いずれにせよ、離散変分導関数法の本質は、勾配流構造を保ったまま有限次元に落とす適切な空間離散化と、その上での離散勾配法の適用の組み合わせである（と、現在では本稿著者は理解している）。しかしながら、まだ偏微分方程式に対する構造保存数値解法がほとんど考えられていなかった 1990 年代に、時間・空間方向を一気に扱う手法として誕生した離散変分導関数法 [7] は、革新的な研究であったと言える。

最近の同手法の発展について触れておく。同手法はそもそも差分法をベースとして構築されたが、Galerkin 法（有限要素法）にも拡張可能である [6]。また、さらに不連続 Galerkin 法にも拡張可能であることも分

かっているが[1], 空間次元 1 次元の場合が精査された段階で, 高次元の場合は, 実用的な計算性能の実証を含めて, 今後の検証が必要である。最後に, 離散変分導関数法そのものの進展ではないが, その新たな応用例として, 可積分系の研究から転じた「自己適合格子数値解法」の設計に同手法が有用である(場合によりほとんど「必須」である)ことが, 最近の研究により分かってきている[19, 23].

3 「構造保存」と今後の数値計算

以上, ごく大雑把に数値計算における「構造保存」の考え方について概観した。本稿の最後に, 構造保存数値解法, 及びそれを含む数値解析学全体の未来について私見を述べておく。

まず, 微分方程式の構造保存数値解法に関しては, 微分方程式の数値解法の歴史においていわば「後半」にあたりと冒頭で述べた。このことを, 計算科学におけるより実用的な数値解法の観点から少し精密に言い直したい。(以下, いちいち繰り返さないが, あくまで著者なりの見方であり, 必ずしも学界の定説ではない。) もともと, 微分方程式の数値解法は「一様な空間格子」「固定の時間刻み幅」の場合からスタートしたと考えられる。これを「第一世代」の算法と呼ぼう。しかしながら, より効率的な計算のためには, 解の変化が急激なところに計算資源を集中させる方が有利である。そのための一般的手法として, 空間方向には動的格子法([11] など), 時間方向には適応時間刻み幅制御法([9, II.4] など)などがあり, 一定程度確立されていると言ってよい。これらを統合した解法は, いわば「第二世代」の計算法であると言える。一方で, 本稿で述べた構造保存数値解法は, (上の Lyapunov 理論のくぐりで可変時間刻み幅の場合に触れたことを除いて) 基本的には, 第一世代の「一様」「固定刻み」の世界に戻り, 動的・可変格子とは違う方向で, より良い算法を目指したものである。便宜上, ここではそれを「第三世代」と呼ぼう。これらの算法は, 時間・空間格子を固定したままでも, 特に数値解の長時間における挙動において, 第二世代の算法よりもしばしば優れた結果を与えることが分かっている。しかしながら, ある程度の成功を収めたこの第三世代も, 基礎的な研究が積み上がり一定の成熟に至った現在, 研究分野としては少し窮屈になったように著者は感じている。次はいよいよ, 第二世代と第三世代を融合した第四世代, 「時間・空間適応的構造保存数値解法」の構築へと進むべきであろう。この課題はなかなか困難であるが, いくつかの挑戦はすでに始まっている([5, 18, 19] など)。

著者の力不足で, 本講演および本稿では, 微分方程式の場合しか扱えなかったが, たとえば制御論・線形計算分野における Hamiltonian 固有値問題など, 他の数値計算分野においても, 「構造保存」の考え方は有効であると考えられる。数値解析学全体で, このような観点から研究に広がりが出ることが期待される。

最後に, 本稿で扱ったような「構造」はすべて数学的なもので, その美しさの反面, 現実の科学・工学の応用問題において, 必ずしも担保されるものではないことにも注意したい。例えば現実の物理系では境界条件の都合, あるいは領域内でのエネルギー流入, 格子欠陥等による部分的な方程式の破れなどから, 構造保存解法で通常想定するような綺麗な数値構造が具備しない場合がほとんどである。そのような系において構造保存解法は完全に無力なのか, 一定程度踏みとどまれるのか, そろそろ本格的な検討が必要な時期に来ているように著者には思われる。本稿にまつわる研究会は, 数値解析学を含む応用数学の研究者と, 現実の問題を扱う物理学者・生物学者等の対話がキーワードであった。研究会の場でも一定の交流はできたものと思っているが, 上述の論点の探究に向けて, 本稿がより一層の交流のきっかけとなることを願ってやまない。

謝辞。欠落を恐れてここにはいちいちお名前を記さないが, 本稿・本講演の内容およびそこにおける視点の多くは, 新旧学生を含む共同研究者の方々との協働により得られたものである。

参考文献

- [1] Aimoto, Y., Matsuo, T., and Miyatake, Y., A local discontinuous Galerkin method based on variational structure, *Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. S*, **8** (2015), 817–832.
- [2] Budd, C. and Piggott, M. D., Geometric integration and its applications, in *Handbook of Numerical Analysis*, XI, North-Holland, Amsterdam, 2003, 35–139.

- [3] Celledoni, E., Grimm, V., McLachlan, R. I., O’Neale, D., Owren, B., and Quispel, G. R. W., Preserving energy resp. dissipation in numerical PDEs using the “average vector field” method, *J. Comput. Phys.*, **231** (2012), 6770–6789.
- [4] Dahlby, M. and Owren, B., A general framework for deriving integral preserving numerical methods for PDEs, *SIAM J. Sci. Comput.*, **33** (2011), 2318–2340.
- [5] Eidnes, S., Integral preserving numerical methods on moving grids, Master’s thesis at Norwegian University of Science and Technology, 2013.
- [6] Furihata, D. and Matsuo, T., Discrete Variational Derivative Method: A Structure-Preserving Numerical Method for Partial Differential Equations, CRC Press, Boca Raton, 2011.
- [7] 降旗 大介, 森 正武, 偏微分方程式に対する差分スキームの離散的変分による統一的導出, 日本応用数理学会論文誌, **8** (1998), 317–340.
- [8] Hairer, E., Lubich, C., and Wanner, G., Geometric Numerical Integration, Springer–Verlag, Heidelberg, 2006.
- [9] Hairer, E., Nørsett, S. P., and Wanner, G., Solving Ordinary Differential Equations I (2nd ed.), Springer–Verlag, Heidelberg, 1993.
- [10] Hairer, E., and Wanner, G., Solving Ordinary Differential Equations II (2nd ed.), Springer–Verlag, Heidelberg, 2010.
- [11] Huang, W. and Russell, R. D., Adaptive Moving Mesh Methods, Springer, Heidelberg, 2011.
- [12] Humphries, A. R. and Stuart, A. M., Runge–Kutta methods for dissipative and gradient dynamical systems, *SIAM J. Numer. Anal.*, **31** (1994), 1452–1485.
- [13] Ishikawa, A. and Yaguchi, T., Geometric investigation of the discrete gradient method for the Webster equation with a weighted inner product, *JSIAM Lett.*, **7** (2015), 17–20.
- [14] Leimkuhler, B. and Reich, S., Simulating Hamiltonian Dynamics, Cambridge University Press, Cambridge, 2004.
- [15] 松尾宇泰, 宮武勇登, 微分方程式に対する構造保存数値解法, 日本応用数理学会論文誌, **22** (2012), 213–251.
- [16] Matsuo, T. and Furihata, D., A stabilization of multistep linearly implicit schemes for dissipative systems, *J. Comput. Appl. Math.*, **264** (2014), 38–48.
- [17] 宮武勇登, 長時間積分用のエネルギー保存解法, 本講究録掲載予定.
- [18] Miyatake, Y. and Matsuo, T., A note on the adaptive conservative/dissipative discretization for evolutionary partial differential equations, *J. Comput. Appl. Math.*, **284** (2015), 79–87.
- [19] Oguma, K., Sato, S., Matsuo, T., and Feng, B.-F., A self-adaptive moving mesh method for the short pulse equation via its sine-Gordon form, in preparation.
- [20] Quispel, G. R. W. and Capel, H. W., Solving ODE’s numerically while preserving all first integrals, preprint (La Trobe University, Melbourne), 1997.
- [21] Quispel, G. R. W. and McLaren, D. I., A new class of energy-preserving numerical integration methods, *J. Phys. A*, **41** (2008), 045206.
- [22] Sato, S., Matsuo, T., Suzuki, H., and Furihata, D., A Lyapunov-type theorem for dissipative numerical integrators with adaptive time-stepping, *SIAM J. Numer. Anal.*, **53** (2015), 2505–2518.
- [23] Sato, S., Matsuo, T. and Feng, B.-F., A norm-preserving self-adaptive moving mesh integrator for the short-pulse equation, 本講究録掲載予定.