報告番号	※甲　　　第　　　号

主　論　文　の　要　旨

論文題目　偏微分方程式の初期値境界値問題と形状最適化問題に対する数値解法の誤差解析

氏　　名　村　井　　大　介

論　文　内　容　の　要　旨

偏微分方程式の初期値境界値問題は弾性体や流体あるいは電磁場といった場に関する自然現象を記述するために用いられる．それらが定義された空間領域を設計対象にした最適化問題は形状最適化問題とよばれる．ものつくりにおいては，自然現象を予測するために偏微分方程式の初期値境界値問題に対する数値解法の開発が求められている．また，自然現象を制御して最適な設計に導くために形状最適化問題に対する数値解法の開発が望まれている．さらに，それらの数値解法は誤差解析により信頼性が確保されたものであることが期待されている．本論文は，これらの要求の中から次に示す3つの問題に焦点を絞って誤差解析の結果を示そうとするものである．

一つ目は，半線形までを許容した波動方程式に対する数値解法である Staggered Runge-Kutta スキームに注目し，これまで明らかにされてこなかった誤差評価の結果を示す．二つ目は，形状最適化問題の内，物質の密度を設計対象にした連続体の位相最適化問題に対する H1 勾配法とよばれる数値解法に注目し，これに対する誤差評価の結果を初めて示す．三つ目は，境界形状を設計対象にした連続体の形状最適化問題に対する H1 勾配法にも注目し，これに対しても誤差評価の結果を示す．以下でそれらの概要を示す．

Staggered Runge-Kutta スキームは，波動方程式のように時間方向に2階以上の微分を含む方程式に対して，この時間微分を離散化，すなわち方程式の積分範囲を有限個のステップ点で置き換え，そのステップ点上で元の関数を近似する方法の1種として位置付けられる．その特徴として，元の時間2階微分を含む方程式を，中間変数を導入することで時間方向に1階微分を含む連立微分方程式に変換し，この離散化の際に，中間変数と元の微分方程式の解の近似値を互いに半ステップずつずらして構成することで，数値的に安定な解を得られる点があげられる．このステッ

プ点をずらすことで安定な解を得るという考え方は，流体力学や電磁場解析などの分野において，方程式の空間方向，すなわち領域の離散化，いわゆる空間離散化で用いられる Staggered 格子として知られており，Staggered Runge-Kutta スキームはこの考え方を時間方向の離散化に応用したものである．数値解の誤差は領域，および時間方向を離散化した際の計算に用いたステップサイズのべき乗で表され，収束次数である指数部分が大きいほど誤差が小さい数値解法となる．Stagered Runge-Kutta スキームには未知の係数がいくつかあり，これを決めることで，得られる数値解の収束次数も決定される．本研究においては，Staggered Runge-Kutta スキームの初期値境界値問題に対する誤差評価を行うために，新しい数値安定性の概念を導入することで，数値解の収束性を示した．数値解の収束次数については以下の結果を得た．半線形波動方程式を空間離散化した方程式に対して，時間方向の計算に Staggered Runge-Kuta スキームを適用した場合，2 次以上の収束次数を持つ Staggered Runge-Kutta スキームは半線形波動方程式に対しても 2 次収束することが証明された．さらに，通常 Runge-Kutta 法では 4 次の収束次数をもつ数値解法を，空間離散化した初期値境界値問題に適用すると，2 次の収束次数になることが知られているが，本論文では，4 次の収束次数を持つ Staggered Runge-Kutta スキームを同問題に適用すると，3 次収束することを示した．また，一般的な誤差評価に用いられるエネルギーノルムによる誤差評価において，2 次以上の Staggered Runge-Kutta スキームに対して，空間離散化した初期値境界値問題の数値解が 2 次収束することを示した．2 次の Staggered Runge-Kutta スキームである Leapfrog と，4 次のスキームである Staggered RK4 を半線形波動方程式の例である 1 次元 Sine-Gordon 方程式に適用し，その誤差を測定することで，理論的な結果が成立することを確かめた．

また，状態方程式である初期値境界値問題が定義された位相最適化問題については，最適化の指標を与える目的関数を，領域で一定に定められた初期密度を変更することで，制約条件である制約関数を満たしながら減少させる方法で計算を行った．密度をシグモイド関数を用いて表現し，シグモイド関数の定義域を変化させることで領域の密度変化を与えた．目的関数および制約関数に対する Lagrange 関数が停留する条件を導出することで，目的関数，制約関数それぞれの随伴方程式，および密度勾配を構成した．密度勾配を用いて密度更新を行うと，得られた密度分布が元の密度分布の属する集合に属さないという，数値解の不正則性がおこり，数値不安定が生じる原因となる．したがって，状態方程式，および随伴方程式を解いて得られた解を用いて構成した密度勾配を，H1 勾配法によって修正することで，数値不安定を回避し，修正した密度勾配を用いて密度の変動方向を構成した．これに正のステップサイズを乗じることで密度を変動させ，この過程を繰り返すことで最適な密度分布を求めた．ここで，最適な密度分布が得られるまでの反復計算回数

とステップサイズの積は最適な密度分布を得るまでの密度の変動量の合計を表し，状態方程式，目的関数および制約関数の決め方のみに依存する．最適化の反復計算の過程で，密度分布が定義された領域を格子，あるいは有限要素に分割し，状態方程式，目的関数，制約関数それぞれの随伴方程式および H1 勾配法を，数値解を H1 ノルムで測定して，格子長あるいは要素の最大辺の長さの 1 乗で収束する，すなわち空間離散化において 1 次収束するように計算した場合，最終的に得られた密度勾配および密度分布に含まれる誤差は，密度変動のステップサイズに依存せず，領域の離散化誤差のみに依存し，その収束次数は H1 ノルムで測定して 1 次であることが示された．また，2 次元 Poisson 問題および線形弾性問題をそれぞれ状態方程式として，質量一定の下で外力仕事最小化問題を構成し，このそれぞれの問題の数値解の誤差を測定することで，理論的に得られた誤差評価が成立することを確かめた．

状態方程式である初期値境界値問題が定義された形状最適化問題についても，位相最適化問題と同様に，目的関数および制約関数に対する Lagrange 関数の停留条件から，目的関数および制約関数それぞれの随伴方程式および形状勾配を導出した．形状勾配の導出のために形状微分の公式を導入し，形状勾配は領域の境界上，および領域全体の 2 通りで評価した．位相最適化問題と同様，これらの形状勾配を用いて新たに構成した領域は，元の領域の属する集合には属さない．数値不安定を回避するため，H1 勾配法によって形状勾配を修正し，ステップサイズを乗じることで，形状の更新方向を構成した．この計算の過程で，初期領域を格子あるいは要素に分割し，状態方程式，目的関数，制約関数に対する随伴方程式を，数値解を H1 ノルムで測定して格子長あるいは要素の最大辺の長さの 2 乗で収束する，すなわち空間離散化において 2 次収束するように計算し，H1 勾配法の数値解を 1 次収束するように計算した場合，形状更新を表す方向ベクトルに含まれる誤差は，形状勾配を領域の境界上，内部どちらで評価した場合でも，格子長あるいは要素の最大辺の長さ，および領域変動のステップサイズそれぞれに対して，1 次収束することが示された．数値例として，状態方程式に 2 次元 Poisson 問題および線形弾性問題を仮定し，体積一定の制約の下で外力仕事を最小化する問題を構成し，これらの問題の数値解に含まれる誤差を計算することで，理論的に示した誤差評価が成立することを確かめた．

これら 3 つの誤差評価が示されたことにより，ものつくりの設計において半線形までを許容した波動方程式に対して Staggered Runge-Kutta スキームを用いる場合と連続体の位相および形状最適化問題に対して H1 勾配法を用いる場合は，本論文で示された条件の下で信頼性が確保されたことになる．以上の成果は，それ以外の数値解法に対する誤差解析に対しても方法論を提供するものともなっている．