

2023年度共同利用研究報告書

2023年09月14日

所属・職名 東北大学 大学院理学研究科・教授

正宗 淳

		整理番号	2023a021	
1.研究計画題目	離散微分形式と均質化法の融合による異方性を持つ場の数値計算手法の開発と産業への応用			
2.新規・継続	継続			
3.種別	一般研究			
4.種目	短期共同研究			
5.開催方法	ハイブリッド開催			
6.研究代表者	氏名	正宗 淳		
	所属 部局名	東北大学 大学院理学研究科	職名	教授
7.研究実施期間	2023年05月12日(金曜日)～2023年05月14日(日曜日)			
8.キーワード	離散微分形式, 均質化法, 異方性材料, 半導体デバイス, 最適設計			
9.参加者人数	13人			

10.本研究で得られた成果の概要

本IMI共同利用短期共同研究の実施により、以下の3点を参加者の間で共有することが出来た: (1) 物理現象の数値モデルや偏微分方程式の数値解法に微分形式を取り入れる試みが、数学的に整った枠組みを提供できていること; (2) 微分形式を取り入れた数値計算手法が、産業界に現れる具体的な問題に有効であること; (3) 半導体デバイスに関連するような電磁場問題において、微分形式を考慮することが数値モデルと離散化手法の導出過程で重要であること。

これら今年度に共有した知見、および昨年度に実施した共同研究の成果を受けて、複数の参加者が興味を持つ均質化法と微分形式を用いた数値モデルとの融合をさらに進めていく。例えば電子デバイスの設計などにおいて、産業界には周期的な微細構造を内部に含む製品が多く見られる。自由討論の場で、これら周期的な微細構造を持つ製品の設計を行うために、均質化法と微分形式を用いた数値モデルとの融合に基づいて最適化を行うことの検討がなされた。この検討により、今年度は均質化法の数学的基礎の知見と微分形式を用いた数値モデルの物理学的基礎の知見を得た。

そこで本IMI共同利用短期共同研究を継続し、微分形式を用いた数値モデルの定式化について議論を深めた上、微分形式を用いた数値計算手法の理解を深めること、均質化法と微分形式に基づく数値モデリングの融合を目指すこと、の2点を計画するとの結論に至った。

2023年度 IMI 共同利用研究 報告

研究計画題目: 離散微分形式と均質化法の融合による異方性を持つ場の数値計算手法の開発と産業への応用

整理番号: 共 2023a021

研究代表者: 正宗 淳 (東北大学・大学院理学研究院・教授)

研究実施期間: 2023年5月12日(金)~2023年5月14日(日)

1 背景と目的

有限要素外積解析は、ある種の楕円型方程式に対して適合的かつ安定な混合型有限要素法を定式化し、その誤差評価を与えるための統一的な枠組みであり、2006年頃に Aronold–Falk–Winther らが中心となって提案した。

近年、有限要素外積解析の他にも、物理現象の数値モデルや偏微分方程式の数値解法に微分形式を取り入れる試みは、1966年に Branin によって著された論文を端緒に、数値流体力学や計算電磁気学を始めとする様々な分野で盛んに行われている。数値流体力学の分野では、安定性に優れたスキームを開発するために離散化後にもある種のエネルギー評価が成り立つような離散化方法が提案されており、例えば微分形式との対応が明らかにされたミメティック離散化法がある。計算電磁気学の分野では、高周波解析などで有効である辺要素有限要素法が Maxwell 方程式の微分幾何学的な構造と関係していることが Bossavit によって指摘され、得られた知見を元に現在も発展を続けている。離散力学の分野では、力学の幾何学的な記述法に対応する離散版の理論を構築するため、Hirani らによって離散外積解析が開発され、例えばコンピュータグラフィックスなど他の分野への応用も展開されている。

数値モデルや数値計算手法に微分形式を取り入れることで、例えば“流れ”に現れる flow (1形式) と flux (2形式) とを区別して取扱うことが可能となり、空間と物理量の関係がより明確になる、という利点がある。この利点は、実際に我々が観測可能な測定器を通じた観測結果 (flux に相当) を数値モデルの中で扱う際の道具にもなる。この考え方は工学的にも取り入れられ、優れた数値解法が開発されている。分野によってばらつきはあるものの、離散外積解析、離散微分幾何学、差分形式、ベクトル差分解析など、適用される分野に応じて様々な名前では呼ばれている。以上の背景を元に、昨年度に我々が実施した短期共同研究では、微分形式を考慮した数値計算手法の一つとして有限要素外積を取り上げ、

その数学的基礎に関する知見を獲得し、産業界における具体的なニーズに数学の立場からどのような貢献が可能かを議論した。その結果、複数の参加者が興味を持つ均質化法と微分形式を用いた数理モデルとの融合を進めていくとの議論があった。例えば電子デバイスの設計などにおいて、産業界には周期的な微細構造を内部に含む製品が多く見られる。自由討論の場で、これら周期的な微細構造を持つ製品の設計を行うために、均質化法と微分形式を用いた数理モデルとの融合に基づいて最適化を行うことの検討がなされた。

この成果を受けた本年度の短期共同研究では、産業応用の例として引き続き半導体デバイスの設計を念頭に、製品が持つ微細な周期性からくるマルチスケール性を考慮した数値計算手法として近年注目を集めている均質化法と微分形式を考慮した数理モデル化・数値計算手法の融合を深化させることを目指して、その基礎となる数学的・物理的考察を行うことを目的とした。

2 実施状況

前節で述べた背景を元に本短期共同研究では、まず最初に工学系の若手研究者である松島氏から、工業製品の最適設計に関連する話題を提供いただき、既に周知の事実以外の、我々にとって新しい産業界のニーズの発掘を行った。

続いて有限要素法を用いた電磁場問題の数値解析を専門とする田上氏が、電磁場問題に関する数理モデルと、定式化に必要となる関数空間、さらには de Rham 複体との関連に触れながら、偏微分方程式およびその離散化方程式のいずれにおいても、電磁場問題において微分形式が重要となることを紹介した。

さらに微分形式を用いた数理モデリングの数学的基礎について研究代表者の私が、また均質化法の数学的基礎について上村氏が、それぞれ紹介した。

最後に産業界から参加頂いた DeepFlow の深川氏に、微分形式を用いた物理現象、特に流れ問題の数理モデリングについて、物理的側面を中心に解説いただいた。

これら各氏の紹介・解説を受けた参加者による自由討論の場を設けて、今回の共同利用を元にした今後の研究の展開などについて議論を行った。

3 得られた成果

物理現象の数理モデルや偏微分方程式の数値解法に微分形式を取り入れる試みが数学的に整った枠組みを提供できていること、産業界に現れる具体的な数値計算に有効であること、特に半導体デバイスに関連するような電磁場問題において数学的定式化と離散化手法

における微分形式を考慮することの重要性・親和性, の3点が, 5名の講師の講演から参加者の間で共有することが出来た.

これらの成果と昨年度に実施した共同研究の成果を受けて, 複数の参加者が興味を持つ均質化法と微分形式を用いた数理モデルとの融合をさらに進めていくとの議論があった. 例えば電子デバイスの設計などにおいて, 産業界には周期的な微細構造を内部に含む製品が多く見られる. 自由討論の場で, これら周期的な微細構造を持つ製品の設計を行うために, 均質化法と微分形式を用いた数理モデルとの融合に基づいて最適化を行うことの検討がなされた. 今年度は, 均質化法と微分形式を用いた数理モデルそれぞれの数学的・物理学的基礎の知見獲得が成果として挙げられる.

そこで本 IMI 共同利用短期共同研究を継続し, 微分形式を用いた数理モデルの定式化について議論を深めた上で, 微分形式を用いた数値計算手法の理解を深めること, 均質化法と微分形式に基づく数理モデリングの融合を目指すこと, の2点を計画するとの結論に至った.

その後, 今回の共同研究の代表者である私を中心とした研究組織を立ち上げて IMI 共同利用短期共同研究に継続して応募することが, 参加者の間で確認された. さらに, 本共同研究では複数の産業界および他分野からの参加者がいることから, 単に微分形式を用いた数理モデルの定式化と数値計算手法の提案において数学的な厳密性を追い求めるだけでなく, 産業界への応用可能性についても議論できている点が, IMI 共同利用の目的に良く合致している点にも触れておきたい.

開催日:2023/05/12~2023/05/14

◆ 離散微分型式と均質化法の融合による異方性を持つ場の数値計算手法の開発と産業への応用 | 共2023a021

カテゴリ: イベント タグ: 一般研究 短期共同研究

開催概要

- 開催方法:九州大学 伊都キャンパスとZoomミーティングによるハイブリッド開催
- 開催場所:九州大学 伊都キャンパス ウエスト1号館 D棟 4階 IMIオーディトリウム (W1-D-413)
- 主要言語:日本語
- 共催:九州大学マス・フォア・インダストリ研究所
- 共催:科学研究費助成事業 学術変革領域研究(B)
“数学を基軸とした形状設計モデリング”
研究課題/領域番号 23B201
領域代表者 山田 崇恭 (東京大学 准教授)
- 共催:科学研究費助成事業 学術変革領域研究(B)
“数学に基づいた構造最適化における基礎理論の構築とボトムアップ型展開”
(代表者: 正宗 淳, 課題番号: 23H03798)
- 種別・種目: 一般研究-短期共同研究
- 研究計画題目:離散微分型式と均質化法の融合による異方性を持つ場の数値計算手法の開発と産業への応用
- 研究代表者:正宗 淳 (東北大学 大学院理学研究科・教授)
- 研究実施期間:2023年5月12日(金)~2023年5月14日(日)
- 公開期間:2023年5月12日(金)
- 研究計画詳細:https://joint1.imi.kyushu-u.ac.jp/research_chooses/view/2023a021

プログラム

5月12日(金)

● 13:00 - 13:35

松島 慶 (東京大学)
最適設計法の波動問題への応用について

● 13:40 - 14:00

村井 直樹 (東京大学)
均質化法を用いた電磁メタマテリアルのトポロジー最適化