Scalar auxiliary variable approach の紹介とその拡張

名古屋大学大学院工学研究科　剱持 智哉 *

Tomoya Kemmochi
Graduate School of Engineering, Nagoya University

1　はじめに

本研究では, 変分構造を持つ発展方程式に対する構造保存的な時間離散化手法の 1 つである, Scalar auxiliary variable approach (SAV 法) [5] について考察する. ここでいう変分構造を持つ発展方程式とは, 反応拡散方程式

$$u_t = \Delta u - F'(u)$$

をはじめとする散逸系や, KdV 方程式

$$u_t = -\partial_x(u_{xx} + 3u^2)$$

をはじめとする保存系のことを指す. これらは, D を非正定値または歪対称の線形作用素とするとき, 適切なエネルギー汎関数 E に対して,

$$u_t = D\nabla E(u)$$

という形をしている. ただし, ∇E は (L^2 の意味での) Fréchet 微分である. この構造により, エネルギー散逸性 $\frac{d}{dt}E[u(t)] \le 0$ や保存性 $\frac{d}{dt}E[u(t)] = 0$ が成り立つ.

方程式のエネルギー構造は, 多くの場合, 何かしらの物理的現象などを反映しているため, 数値計算 (時間離散化) においても, これらの性質を持つことが望ましい. しかしながら, Euler 法をはじめとする汎用的な解法では, 一般にはこれらの性質が保存されないことが知られている. したがって, エネルギー構造を保存する数値解法 (構造保存数値解法) を構築することは重要な課題であり, すでに多くの解法が知られている. 具体例としては, 線形安定化法 [6], convex splitting 法 [1], 離散変分導関数法 (離散勾配法) [2] などがある. これらの解法は, エネルギー構造が保存されるだけでなく, 数値的な安定性を持つことが知られている. 一方で, 多くの場合, 非線形スキームとなっていることに注意しておく.

最近 (2018 年) になり, 中国の研究者によって, Scalar auxiliary variable approach (SAV 法) という解法が提案された [5]. この解法は, 元々は Allen-Cahn 方程式と Cahn-Hilliard 方程式に対して提案された解法なのだが, (適切な意味で) 構造保存的であり, かつ, 線形スキームになっているという特徴を持つ. しかも, 各ステップで解く線形方程式は, (元の方程式が自励的であれば) 時間ステッ

* Email: kemmochi@na.nuap.nagoya-u.ac.jp

プに依存しない定数係数の線形方程式であるというメリットもあり, 関連する研究が中国を中心に流行している. 一方で, 詳しくは次節以降で説明するが, 方程式の適用範囲がやや狭いというデメリットがあり, さらに,「なぜうまくいくのか」といった根本的な問題が残されている. そこで本研究では, これらの問題の解決に取り組む.

まず, SAV 法の拡張について考察する. SAV 法の適用のためには,「エネルギー汎関数のポテンシャル部分が下に有界である」という条件がつく. しかし, KdV 方程式など, この条件を満たさない方程式は数多くある. そこで, エネルギーのポテンシャル部分を適切に分解することにより, この条件を取り除くことを考える. その後, SAV 法が変分構造を持つことを示す. すなわち, SAV 法のスキームは, 適切な空間上の勾配系として書かれることを示す. これにより, SAV 法が勾配系に対するある種の離散勾配法であることを示し,「SAV 法がなぜうまくいくのか」という疑問に対する 1 つの回答を与える.

本稿の構成は以下のようになっている. まず, 第 2 節で, SAV 法のアルゴリズムを解説する. その後, 第 3 節で SAV 法を拡張する方法を提案する. さらに第 4 節において, SAV 法が変分構造を持つことを示す.

なお, 本研究は, 佐藤峻氏 (東京大学) との共同研究を含む.*1 また, 詳細な内容は, 現在執筆中の論文 [3] に記述する. 紙面の都合上, 本稿には数値例を掲載しない. 数値例についても [3] を参照されたい. さらに, 本稿では時間離散化のみに着目して記述することにも注意しておく.

2 Scalar auxiliary variable approach (SAV 法) とは

この節では, Scalar auxiliary variable approach (SAV 法) のアルゴリズムを, 反応拡散系を例に説明する. 以下の汎関数を考える:

$$E[u] = \int_\Omega \left(\frac{1}{2}|\nabla u|^2 + F(u)\right)dx, \quad u \in H_0^1(\Omega).$$

ただし, $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ は領域であり, F は $\mathbb{R}$ 上の与えられた関数である. このエネルギーに対応する L^2 勾配流は

$$u_t = \Delta u - F'(u) \tag{1}$$

であり, 適切な境界条件のもとで, エネルギー散逸性

$$\frac{d}{dt}E[u(t)] \leq 0$$

が成り立つのであった.

SAV 法のアイデアの肝は, 補助変数 (scalar auxiliary variable) を導入することで, 勾配流 (1) を書き換えることである. まず,

$$E_1[u] = \int_\Omega F(u)dx$$

*1 本研究集会の講演依頼を頂いた後に始まった共同研究であるため, 本稿の著者は剱持のみになっている. 実際のところ, 第 3 節の内容の大部分は佐藤氏のアイデアによるものである.

とおき, E_1 が (u について) 下に有界であると仮定する．このとき, 補助変数 r を

$$r(t) = \sqrt{E_1[u(t)] + a}$$

で定義する．ただし, $a \in \mathbb{R}$ は $a > -\inf_u E_1[u]$ を満たす実数である．このとき, $r/\sqrt{E_1[u]} = 1$ に注意すると, 勾配流 (1) は

$$\begin{cases} u_t = \Delta u - \dfrac{r}{\sqrt{E_1[u] + a}} F'(u), \\ \dot{r} = \dfrac{1}{2\sqrt{E_1[u] + a}} (F'(u), u_t)_\Omega \end{cases} \tag{2}$$

と書き換えることができる．ただし, $(\cdot,\cdot)_\Omega$ は $L^2(\Omega)$ の内積であり, (2) の第 2 式は r を時間に関して微分することで得られる．書き換えた方程式 (2) の方が複雑に見えるが, 以下の手順により, (2) に基づいて散逸的な解法を構築することができる．

まずは, 他の構造保存解法と同様に, 時間微分を差分商に置き換える．例えば, Crank-Nicolson 法によって, 以下のように離散化することが考えられる:

$$\begin{cases} \dfrac{u^{n+1} - u^n}{\tau} = \Delta u^{n+\frac{1}{2}} - \dfrac{r^{n+\frac{1}{2}}}{\sqrt{E_1[u^{n+\frac{1}{2}}] + a}} F'(u^{n+\frac{1}{2}}), \\ \dfrac{r^{n+1} - r^n}{\tau} = \dfrac{1}{2\sqrt{E_1[u^{n+\frac{1}{2}}] + a}} \left(F'(u^{n+\frac{1}{2}}), \dfrac{u^{n+1} - u^n}{\tau} \right)_\Omega. \end{cases}$$

ただし, τ は時間ステップ幅, u^n は n ステップ目の数値解であり, $u^{n+\frac{1}{2}} = (u^n + u^{n+1})/2$ である．このままでは非線形のスキームであるが, 非線形なパートを既知の関数として置き換えることで, 線形スキームに書き換えることができる:

$$\begin{cases} \dfrac{u^{n+1} - u^n}{\tau} = \Delta u^{n+\frac{1}{2}} - \dfrac{r^{n+\frac{1}{2}}}{\sqrt{E_1[\bar{u}^{n+\frac{1}{2}}] + a}} F'(\bar{u}^{n+\frac{1}{2}}), \\ \dfrac{r^{n+1} - r^n}{\tau} = \dfrac{1}{2\sqrt{E_1[\bar{u}^{n+\frac{1}{2}}] + a}} \left(F'(\bar{u}^{n+\frac{1}{2}}), \dfrac{u^{n+1} - u^n}{\tau} \right)_\Omega. \end{cases} \tag{3}$$

ここで, $\bar{u}^{n+\frac{1}{2}}$ は任意の関数であるが, 精度の観点から, $u^{n+1/2}$ に対する局所 $O(\tau^2)$ 近似を採用する．例えば, 時間刻み $\tau/2$ の前進 Euler 法による近似や, 補外 $(3u^n - u^{n-1})/2$ などがこの条件を満たす．このスキームは, u^{n+1} と r^{n+1} に関して線形のスキームになっている．また, 次の意味で, 散逸的である．

補題 1. スキーム (3) の解 (u^n, r^n) に対し, 修正エネルギー $\tilde{E}^n$ を

$$\tilde{E}^n = \frac{1}{2}\|\nabla u^n\|^2_{L^2(\Omega)} + (r^n)^2$$

で定義する．このとき, 無条件で $\tilde{E}^{n+1} \le \tilde{E}^n$ が成り立つ．

さらに, 詳細は省略するが, ブロック Gauss 消去法によって r^{n+1} を消去することができ, そのプロセスの中に現れる計算が (n に依存しない) 定数係数の楕円型方程式 2 つであることがわかる．した

がって, 他の多くの構造保存解法とは異なり, 計算コストを大きく抑えることができる. また, 誤差評価に関する研究も行われており, 期待通り $O(\tau^2)$ の精度であることが知られている [4].

このように SAV 法は良い性質を持つ解法であるのだが, 上のプロセスにおいて,「E_1 が下に有界である」という条件を本質的に用いている. 実際, 補助変数 r を導入する際に根号の中に E_1 を入れているからである. そのため, エネルギー汎関数が

$$E[u] = \int_\Omega \left(\frac{1}{2}|\nabla u|^2 - \frac{1}{p+1}|u|^{p+1} \right), \qquad E[u] = \int_0^1 \left(\frac{1}{2}(u_x)^2 - u^3 \right)$$

といった形の場合は, そのまま適用することができない. そこで次節では, この条件を取り除き, 適用範囲を広げることを考える.

3 SAV 法の拡張

この節では, 方程式を少し一般化して議論する. まず, V を 実 Hilbert 空間 とし, その内積を $\langle \cdot, \cdot \rangle$ と書く. また, その双対を V^* とする. 複素 Hilbert 空間においても同様の議論が可能であるが, 本稿では簡単のため実 Hilbert 空間に限って記述する.

E を V (のある開部分集合) 上で定義された実数値 C^1 級エネルギー汎関数とし, $\nabla E(u)\colon V \to \mathbb{R}$ を E の $u \in V$ における Fréchet 微分とする. E は非有界でも良い. また, D を, V 上の非正定値対称または歪対称の (一般に非有界な) 線形作用素とする. この記号のもとで, 以下の発展方程式を考える:

$$\dot{u}(t) = D\nabla E(u(t)), \qquad t \in (0,T). \tag{4}$$

ただし, $u\colon (0,T) \to V$ は未知関数であり, $T > 0$ である. 以下, 現れる演算 ($D\nabla E(u(t))$ など) はすべて well-defined であるとする. この方程式は, D の性質によって, 散逸系または保存系となる. すなわち,

$$D \text{ が非正定値対称} \implies \frac{d}{dt}E[u(t)] \le 0,$$
$$D \text{ が歪対称} \implies \frac{d}{dt}E[u(t)] = 0$$

が成り立つ.

方程式 (4) に対して SAV 法を適用することを考える. はじめに, 汎関数 E に対して, 次を仮定する.

仮定 1. エネルギー汎関数 E は, 以下の 3 項に分解できる:

$$E(u) = \frac{1}{2}\langle u, Lu \rangle + E_{\mathrm{L}}(u) - E_{\mathrm{U}}(u).$$

ただし, L は V 上の非負定値な対称線形作用素であり, E_{L} と E_{U} は下に有界な C^1 汎関数である.

注意 1. 任意の汎関数は上のように分解できる. 実際, 任意の線形作用素 L に対して, $\hat{E}(u) = E(u) - \frac{1}{2}\langle u, Lu \rangle$ とおくと, 明らかに

$$\hat{E}(u) = \left(\hat{E}(u) + \hat{E}(u)^2 \right) - \hat{E}(u)^2$$

$$
\begin{aligned}
&= \hat{E}(u)^2 - \left(\hat{E}(u)^2 - \hat{E}(u)\right) \\
&= \left(\hat{E}(u) + \hat{E}(u)^4\right) - \hat{E}(u)^4 \\
&= \cdots
\end{aligned}
$$

である．したがって, 仮定 1 は単なる記号の定義に過ぎない．また, 分解の方法が一意でないことにも注意しておく．当然ながら, 与えられた関数に対して, どのような分解が “良い” ものであるかはケースバイケースである．

上の記号のもとで, 2 つの補助変数 r_{L}, r_{U} を,

$$
r_{\mathrm{X}}(t) \coloneqq \sqrt{E_{\mathrm{X}}(u(t)) + a_{\mathrm{X}}} \tag{5}
$$

で定義する．ただし, $\mathrm{X} = \mathrm{L}$ または U であり, $a_{\mathrm{X}} > -\inf_u E_{\mathrm{X}}(u)$ は実数である．これらを時間について微分すると,

$$
\dot{r}_{\mathrm{X}}(t) = \frac{1}{2\sqrt{E_{\mathrm{X}}(u(t)) + a_{\mathrm{X}}}} \langle \nabla E_{\mathrm{X}}(u(t)), \dot{u}(t) \rangle
$$

となる．このとき, 方程式 (4) は以下のように書き換えられる:

$$
\begin{cases}
\dot{u}(t) = D\left(Lu + \dfrac{r_{\mathrm{L}}}{\sqrt{E_{\mathrm{L}}(u(t)) + a_{\mathrm{L}}}} \nabla E_{\mathrm{L}}(u(t)) - \dfrac{r_{\mathrm{U}}}{\sqrt{E_{\mathrm{U}}(u(t)) + a_{\mathrm{U}}}} \nabla E_{\mathrm{U}}(u(t))\right), \\
\dot{r}_{\mathrm{L}}(t) = \dfrac{1}{2\sqrt{E_{\mathrm{L}}(u(t)) + a_{\mathrm{L}}}} \langle \nabla E_{\mathrm{L}}(u(t)), \dot{u}(t) \rangle, \\
\dot{r}_{\mathrm{U}}(t) = \dfrac{1}{2\sqrt{E_{\mathrm{U}}(u(t)) + a_{\mathrm{U}}}} \langle \nabla E_{\mathrm{U}}(u(t)), \dot{u}(t) \rangle.
\end{cases} \tag{6}
$$

この書き換えのもとで, 前節と同様に, 次のようなスキームを構築できる:

$$
\begin{cases}
\dfrac{u^{n+1} - u^n}{\tau} = D\left(Lu^{n+\frac{1}{2}} + \dfrac{r_{\mathrm{L}}^{n+\frac{1}{2}}}{\sqrt{E_{\mathrm{L}}(\bar{u}^{n+\frac{1}{2}}) + a_{\mathrm{L}}}} \nabla E_{\mathrm{L}}(\bar{u}^{n+\frac{1}{2}}) - \dfrac{r_{\mathrm{U}}^{n+\frac{1}{2}}}{\sqrt{E_{\mathrm{U}}(\bar{u}^{n+\frac{1}{2}}) + a_{\mathrm{U}}}} \nabla E_{\mathrm{U}}(\bar{u}^{n+\frac{1}{2}})\right), \\
\dfrac{r_{\mathrm{L}}^{n+1} - r_{\mathrm{L}}^n}{\tau} = \dfrac{1}{2\sqrt{E_{\mathrm{L}}(\bar{u}^{n+\frac{1}{2}}) + a_{\mathrm{L}}}} \left\langle \nabla E_{\mathrm{L}}(\bar{u}^{n+\frac{1}{2}}), \dfrac{u^{n+1} - u^n}{\tau} \right\rangle, \\
\dfrac{r_{\mathrm{U}}^{n+1} - r_{\mathrm{U}}^n}{\tau} = \dfrac{1}{2\sqrt{E_{\mathrm{U}}(\bar{u}^{n+\frac{1}{2}}) + a_{\mathrm{U}}}} \left\langle \nabla E_{\mathrm{U}}(\bar{u}^{n+\frac{1}{2}}), \dfrac{u^{n+1} - u^n}{\tau} \right\rangle.
\end{cases} \tag{7}
$$

ただし, $\bar{u}^{n+\frac{1}{2}}$ は前節と同じものである．このスキームも, 次の意味で構造保存的である．

補題 2. スキーム (7) の解 $(u^n, r_{\mathrm{L}}^n, u_{\mathrm{U}}^n)$ に対し, 修正エネルギー $\tilde{E}^n$ を

$$
\tilde{E}^n = \frac{1}{2}\langle u^n, Lu^n \rangle + (r_{\mathrm{L}}^n)^2 - (r_{\mathrm{U}}^n)^2
$$

で定義する．このとき, 無条件で次が成り立つ:

$$
\begin{aligned}
D \text{ が非正定値対称} &\implies \tilde{E}^{n+1} \le \tilde{E}^n, \\
D \text{ が歪対称} &\implies \tilde{E}^{n+1} = \tilde{E}^n.
\end{aligned}
$$

証明は次節で述べることとし, ここでは, スキーム (7) の各ステップにおいて r_{L}^{n+1}, r_{U}^{n+1} を消去することができ, 線形方程式を 3 回解くことで計算が可能であることを示す. まず, $\mathrm{X} = \mathrm{L}, \mathrm{U}$ に対して, $\Phi_{\mathrm{X}} \in V^*$ を

$$\Phi_{\mathrm{X}}(v) = \langle \phi_{\mathrm{X}}, v \rangle, \quad \phi_{\mathrm{X}} = \phi_{\mathrm{X}}\Big(\bar{u}^{n+\frac{1}{2}}\Big) = \frac{1}{2\sqrt{E_{\mathrm{X}}(\bar{u}^{n+\frac{1}{2}}) + a_{\mathrm{X}}}} \nabla E_{\mathrm{X}}(\bar{u}^{n+\frac{1}{2}}) \qquad (v \in V)$$

で定義する. 作用素 Φ_{X} の共役作用素は, $\Phi_{\mathrm{X}}^*(r) = r\phi_{\mathrm{X}}$ で定まる掛け算作用素である. このとき, (7) は以下のように書ける:

$$\frac{1}{\tau}\begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ -\Phi_{\mathrm{L}} & 1 & 0 \\ -\Phi_{\mathrm{U}} & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u^{n+1} - u^n \\ r_{\mathrm{L}}^{n+1} - r_{\mathrm{L}}^n \\ r_{\mathrm{U}}^{n+1} - r_{\mathrm{U}}^n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D & D\Phi_{\mathrm{L}}^* & D\Phi_{\mathrm{U}}^* \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Lu^{n+1/2} \\ 2r_{\mathrm{L}}^{n+1/2} \\ -2r_{\mathrm{U}}^{n+1/2} \end{bmatrix}.$$

これにより,

$$\begin{bmatrix} I - \frac{\tau}{2}DL & -\tau D\Phi_{\mathrm{L}}^* & \tau D\Phi_{\mathrm{U}}^* \\ -\Phi_{\mathrm{L}} & 1 & 0 \\ -\Phi_{\mathrm{U}} & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u^{n+1} \\ r_{\mathrm{L}}^{n+1} \\ r_{\mathrm{U}}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I + \frac{\tau}{2}DL & \tau D\Phi_{\mathrm{L}}^* & -\tau D\Phi_{\mathrm{U}}^* \\ -\Phi_{\mathrm{L}} & 1 & 0 \\ -\Phi_{\mathrm{U}} & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u^n \\ r_{\mathrm{L}}^n \\ r_{\mathrm{U}}^n \end{bmatrix}$$

となる. いま, 作用素 $J \coloneqq I - \frac{\tau}{2}DL$ が可逆であると仮定する. このとき, 方程式の両辺に左から

$$\begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ \Phi_{\mathrm{L}}J^{-1} & 1 & 0 \\ \Phi_{\mathrm{U}}J^{-1} & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

をかけると,

$$\begin{aligned} &\begin{bmatrix} J & -\tau D\Phi_{\mathrm{L}}^* & \tau D\Phi_{\mathrm{U}}^* \\ 0 & -\tau\Phi_{\mathrm{L}}J^{-1}D\Phi_{\mathrm{L}}^* + 1 & \tau\Phi_{\mathrm{L}}J^{-1}D\Phi_{\mathrm{U}}^* \\ 0 & -\tau\Phi_{\mathrm{U}}J^{-1}D\Phi_{\mathrm{L}}^* & \tau\Phi_{\mathrm{U}}J^{-1}D\Phi_{\mathrm{U}}^* + 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u^{n+1} \\ r_{\mathrm{L}}^{n+1} \\ r_{\mathrm{U}}^{n+1} \end{bmatrix} \\ &\qquad = \begin{bmatrix} I + \frac{\tau}{2}DL & \tau D\Phi_{\mathrm{L}}^* & -\tau D\Phi_{\mathrm{U}}^* \\ 2\Phi_{\mathrm{L}}\big(J^{-1} - I\big) & \tau\Phi_{\mathrm{L}}J^{-1}D\Phi_{\mathrm{L}}^* + 1 & -\tau\Phi_{\mathrm{L}}J^{-1}D\Phi_{\mathrm{U}}^* \\ 2\Phi_{\mathrm{U}}\big(J^{-1} - I\big) & \tau\Phi_{\mathrm{U}}J^{-1}D\Phi_{\mathrm{L}}^* & -\tau\Phi_{\mathrm{U}}J^{-1}D\Phi_{\mathrm{U}}^* + 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u^n \\ r_{\mathrm{L}}^n \\ r_{\mathrm{U}}^n \end{bmatrix} \end{aligned}$$

と計算できる. これは, ブロック Gauss 消去法にほかならない. これにより, スキーム (7) は, 2 つの方程式に分解できる. 1 つ目は 2 次元の線形方程式

$$\begin{aligned} &\begin{bmatrix} -\tau\Phi_{\mathrm{L}}J^{-1}D\Phi_{\mathrm{L}}^* + 1 & \tau\Phi_{\mathrm{L}}J^{-1}D\Phi_{\mathrm{U}}^* \\ -\tau\Phi_{\mathrm{U}}J^{-1}D\Phi_{\mathrm{L}}^* & \tau\Phi_{\mathrm{U}}J^{-1}D\Phi_{\mathrm{U}}^* + 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_{\mathrm{L}}^{n+1} \\ r_{\mathrm{U}}^{n+1} \end{bmatrix} \\ &\qquad = \begin{bmatrix} 2\Phi_{\mathrm{L}}\big(J^{-1} - I\big) & \tau\Phi_{\mathrm{L}}J^{-1}D\Phi_{\mathrm{L}}^* + 1 & -\tau\Phi_{\mathrm{L}}J^{-1}D\Phi_{\mathrm{U}}^* \\ 2\Phi_{\mathrm{U}}\big(J^{-1} - I\big) & \tau\Phi_{\mathrm{U}}J^{-1}D\Phi_{\mathrm{L}}^* & -\tau\Phi_{\mathrm{U}}J^{-1}D\Phi_{\mathrm{U}}^* + 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u^n \\ r_{\mathrm{L}}^n \\ r_{\mathrm{U}}^n \end{bmatrix} \end{aligned}$$

である．これは,

$$\begin{bmatrix} -\tau\big\langle \phi_{\mathrm{L}}, J^{-1}D\phi_{\mathrm{L}}\big\rangle + 1 & \tau\big\langle \phi_{\mathrm{L}}, J^{-1}D\phi_{\mathrm{U}}\big\rangle \\ -\tau\big\langle \phi_{\mathrm{U}}, J^{-1}D\phi_{\mathrm{L}}\big\rangle & \tau\big\langle \phi_{\mathrm{U}}, J^{-1}D\phi_{\mathrm{U}}\big\rangle + 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_{\mathrm{L}}^{n+1} \\ r_{\mathrm{U}}^{n+1} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 2\big\langle \phi_{\mathrm{L}}, \big(J^{-1} - I\big)u^n\big\rangle + \big[\tau\big\langle \phi_{\mathrm{L}}, J^{-1}D\phi_{\mathrm{L}}\big\rangle + 1\big] r_{\mathrm{L}}^{n} - \tau\big\langle \phi_{\mathrm{L}}, J^{-1}D\phi_{\mathrm{U}}\big\rangle r_{\mathrm{U}}^{n} \\ 2\big\langle \phi_{\mathrm{U}}, \big(J^{-1} - I\big)u^n\big\rangle + \tau\big\langle \phi_{\mathrm{U}}, J^{-1}D\phi_{\mathrm{L}}\big\rangle r_{\mathrm{L}}^{n} - \big[\tau\big\langle \phi_{\mathrm{U}}, J^{-1}D\phi_{\mathrm{U}}\big\rangle - 1\big] r_{\mathrm{U}}^{n} \end{bmatrix} \tag{8}$$

とも書ける．2 つ目は V 上の線形方程式

$$Ju^{n+1} - \tau D\Phi_{\mathrm{L}}^{*} r_{\mathrm{L}}^{n+1} + \tau D\Phi_{\mathrm{U}}^{*} r_{\mathrm{U}}^{n+1} = \Big(I + \frac{\tau}{2}DL\Big)u^n + \tau D\Phi_{\mathrm{L}}^{*} r_{\mathrm{L}}^{n} - \tau D\Phi_{\mathrm{U}}^{*} r_{\mathrm{U}}^{n}$$

である．こちらは

$$u^{n+1} = \big(2J^{-1} - I\big)u^n + \tau\big(r_{\mathrm{L}}^{n+1} + r_{\mathrm{L}}^{n}\big)J^{-1}D\phi_{\mathrm{L}} - \tau\big(r_{\mathrm{U}}^{n+1} + r_{\mathrm{U}}^{n}\big)J^{-1}D\phi_{\mathrm{U}} \tag{9}$$

と書ける．

以上の手続きをまとめると, 次のようになる．

1. $J^{-1}u^n$, $J^{-1}D\phi_{\mathrm{L}}\big(\bar{u}^{n+1/2}\big)$, $J^{-1}D\phi_{\mathrm{U}}\big(\bar{u}^{n+1/2}\big)$ を計算する．
2. (8) を解いて, r_{L}^{n+1} と r_{U}^{n+1} を求める．
3. (9) を用いて u^{n+1} を求める．

1 ステップ目において, 定数係数の線形方程式 $Jw = f$ を 3 回解く必要があるが, この部分が計算コストの本質的な部分である．したがって, スキーム (7) の各ステップにおいて必要な計算コストは, 線形方程式 $Jw = f$ を 3 回解くために必要なコストと同等である．

注意 2. 上では J の可逆性を仮定したが, これは無理のある家庭ではない．実際, 具体例として想定しているのは, 反応拡散方程式や KdV 方程式であるが, これらはそれぞれ

$$\text{反応拡散: } L = -\Delta,\ D = -I \text{ or } \Delta,$$
$$\text{KdV: } L = -\partial_x^2,\ D = \partial_x$$

である．このそれぞれに対して, $J = I - \frac{\tau}{2}DL$ が可逆であることは容易にわかる．

4　SAV 法の変分構造

SAV 法が構造保存や計算コストの面で優れていることがわかったが, アルゴリズムの構築は不自然である．特に, 非線形項を書き換える際に $r_{\mathrm{X}}/\sqrt{E_{\mathrm{X}}(u) + a_{\mathrm{X}}}$ という項を無理やり付け加えているように見える．もちろん, その結果うまくいくというのは正しいのだが,「本当にその変形がベストなのか?」「なぜうまくいっているのか?」など, 素朴な疑問が残されたままであり, なんとなく「もやもや感」のようなものが残る．そこで本節では, これらの問いに対する 1 つの回答を与えることを目指す．なお, この節の内容は, 佐藤峻氏 (東京大学) との共同研究である．

前節と同じ方程式 (4) を考える．このとき, 補助変数 r_{X} の定義 (5) に注意して, 修正エネルギー $\tilde{E}$ を

$$\tilde{E}(u, r_{\mathrm{L}}, r_{\mathrm{U}}) = \frac{1}{2}\langle u, Lu\rangle + r_{\mathrm{L}}^2 - r_{\mathrm{U}}^2$$

で定義する．これは 2 次関数になっているため，勾配 $\nabla\tilde{E} = [Lu, 2r_{\mathrm{L}}, -2r_{\mathrm{U}}]^T \in V \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}$ は線形である．このことに注意して，SAV の書き換え (6) が，実は $V \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}$ 上の勾配系として書けること，すなわち変分構造を持つことを示す．

前節と記号がかぶってしまうが，以下のように ϕ_{X} $(\mathrm{X} = \mathrm{L}, \mathrm{U})$ を定める:

$$\phi_{\mathrm{X}}(v) \coloneqq \frac{1}{2\sqrt{E_{\mathrm{X}}(v) + a_{\mathrm{X}}}} \nabla E_{\mathrm{X}}(v) \quad \in V^* \cong V.$$

このとき，補助変数 r_{X} の時間微分は

$$\dot{r}_{\mathrm{X}}(t) = \langle \phi_{\mathrm{X}}, \dot{u}(t) \rangle$$

となり，修正エネルギー $\tilde{E}$ の微分は

$$\frac{d}{dt}\tilde{E}(u, r_{\mathrm{L}}, r_{\mathrm{U}}) = \langle Lu + 2r_{\mathrm{L}}\phi_{\mathrm{L}} - 2r_{\mathrm{U}}\phi_{\mathrm{U}}, \dot{u} \rangle.$$

と書かれる．このことに注意すると，(6) が，以下の形で書かれていることがわかる:

$$\begin{cases} \dot{u}(t) = D(Lu + 2r_{\mathrm{L}}\phi_{\mathrm{L}} - 2r_{\mathrm{U}}\phi_{\mathrm{U}}), \\ \dot{r}_{\mathrm{L}}(t) = \langle \phi_{\mathrm{L}}, \dot{u}(t) \rangle, \\ \dot{r}_{\mathrm{U}}(t) = \langle \phi_{\mathrm{U}}, \dot{u}(t) \rangle. \end{cases} \tag{10}$$

この方程式をさらに書き換えていく．

前節と同様に，$\Phi_{\mathrm{X}}(v)(w) = \langle \phi_{\mathrm{X}}(v), w \rangle$ $(v, w \in V)$ とおく．このとき，(10) は

$$\begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ -\Phi_{\mathrm{L}} & 1 & 0 \\ -\Phi_{\mathrm{U}} & 0 & 1 \end{bmatrix} \frac{d}{dt} \begin{bmatrix} u \\ r_{\mathrm{L}} \\ r_{\mathrm{U}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & \Phi_{\mathrm{L}}^* & \Phi_{\mathrm{U}}^* \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \nabla\tilde{E}(u, r_{\mathrm{L}}, r_{\mathrm{U}}),$$

と書ける．ただし，I は V 上の恒等作用素であり，$\Phi_{\mathrm{X}} = \Phi_{\mathrm{X}}(u(t))$ と略記している．左辺の行列の逆行列は

$$\begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ -\Phi_{\mathrm{L}} & 1 & 0 \\ -\Phi_{\mathrm{U}} & 0 & 1 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ \Phi_{\mathrm{L}} & 1 & 0 \\ \Phi_{\mathrm{U}} & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

であるので，(10) はさらに，

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} u \\ r_{\mathrm{L}} \\ r_{\mathrm{U}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ \Phi_{\mathrm{L}} & 1 & 0 \\ \Phi_{\mathrm{U}} & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & \Phi_{\mathrm{L}}^* & \Phi_{\mathrm{U}}^* \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \nabla\tilde{E}(u, r_{\mathrm{L}}, r_{\mathrm{U}}). \tag{11}$$

と書き直せる．そこで，$Z \coloneqq V \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}$, $z(t) = [u(t), r_{\mathrm{L}}(t), r_{\mathrm{U}}(t)]^T \in Z$ とおき，

$$\mathcal{L}(z) = \begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ \Phi_{\mathrm{L}}(u) & 1 & 0 \\ \Phi_{\mathrm{U}}(u) & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & \Phi_{\mathrm{L}}^*(u) & \Phi_{\mathrm{U}}^*(u) \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} : Z \to Z,$$

とおくと，方程式 (11) は

$$\dot{z}(t) = \mathcal{L}(z(t))\nabla\tilde{E}(z(t)), \tag{12}$$

となる．これは Z 上の勾配系にほかならない．以上を命題の形にまとめておく．

命題 1. SAV 法による方程式の書き換え (6) は, $Z = V \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}$ 上の勾配系 (12) として書ける. すなわち, 方程式 (6) は, Z において変分構造を持つ.

さらに, (12) は, もともとの勾配系 (4) の性質を引き継いでいることもわかる. すなわち, 次が成り立つ.

補題 3. もし D が非正定値ならば, $\mathcal{L}(z)$ も非正定値である. もし D が歪対称ならば, $\mathcal{L}(z)$ も歪対称である.

証明. 作用素 $\mathcal{L}(z)$ の定義からすぐわかる. □

この補題により, SAV 法の書き換え (6), すなわち (12) が, エネルギー保存性・散逸性を持つことは自然に導かれる. すなわち, SAV 法は, 実はもともとの V 上の勾配系 (4) を, 補助変数を用いて Z 上の勾配系に書き換えていた, ということがわかる. このように見ると, オリジナルの SAV 法の書き換え (2) は, それなりに自然なものであると言える.

勾配系表示 (12) を用いて, 前節のスキーム (3) を再考しよう. 方程式 (12) に対して Crank-Nicolson 法を適用すると,

$$\frac{z^{n+1} - z^n}{\tau} = \mathcal{L}\Big(z^{n+1/2}\Big)\nabla\tilde{E}\Big(z^{n+1/2}\Big),$$

となるが, $\mathcal{L}$ 内の $z^{n+1/2}$ を $z^{n+1/2}$ の任意の局所 $O(\tau^2)$ 近似 $\bar{z}^{n+1/2}$ に置き換えると,

$$\frac{z^{n+1} - z^n}{\tau} = \mathcal{L}\Big(\bar{z}^{n+1/2}\Big)\nabla\tilde{E}\Big(z^{n+1/2}\Big), \tag{13}$$

と書ける. 実は, これはスキーム (3) そのものである. すなわち, 前節のスキームは, 勾配系表示をした際の非線形作用素の部分 $\mathcal{L}\big(z^{n+1/2}\big)$ を, 既知の関数 $\mathcal{L}\big(\bar{z}^{n+1/2}\big)$ に置き換えていた, と解釈できる. また, スキームの線形性は, $\nabla\tilde{E}(z)$ が z について線形であったこと, すなわち修正エネルギー $\tilde{E}$ が z について 2 次関数であったことに起因していることもわかる. さらに, スキーム (3) のエネルギー構造も, 勾配表現 (13) のもとですぐに示すことができる.

補題 2 の証明. エネルギー保存性だけ示す. 散逸性も同様である. 作用素 L の対称性により, 修正エネルギーの時間に関する差分商は,

$$\begin{aligned}\frac{\tilde{E}^{n+1} - \tilde{E}^n}{\tau} &= \left\langle \frac{u^{n+1} - u^n}{\tau}, Lu^{n+1/2} \right\rangle + \frac{r_{\mathrm{L}}^{n+1} - r_{\mathrm{L}}^n}{\tau} \cdot 2r_{\mathrm{L}}^{n+1/2} - \frac{r_{\mathrm{U}}^{n+1} - r_{\mathrm{U}}^n}{\tau} \cdot 2r_{\mathrm{U}}^{n+1/2} \\ &= \left[\frac{z^{n+1} - z^n}{\tau}, \nabla\tilde{E}(z^{n+1/2})\right]_Z\end{aligned}$$

と書ける. ただし, $[\cdot,\cdot]_Z$ は Z 上で直積から誘導される内積である. いま, z^n は (7) を満たすので,

$$\frac{\tilde{E}^{n+1} - \tilde{E}^n}{\tau} = \left[\mathcal{L}\Big(\bar{z}^{n+1/2}\Big)\nabla\tilde{E}\Big(z^{n+1/2}\Big), \nabla\tilde{E}\Big(z^{n+1/2}\Big)\right]_Z$$

が成り立つ. 補題 3 により, $\mathcal{L}\big(\bar{z}^{n+1/2}\big)$ は Z 上で歪対称なので, $\tilde{E}^{n+1} = \tilde{E}^n$ を得る. □

勾配系表現 (12) は, 単に SAV 法の解釈を与えるだけでなく, 高次のスキームの構築方法に対する示唆を与える. 実際, 詳細は省略するが, 勾配系表現 (12) と, 修正エネルギー $\tilde{E}$ が 2 次関数であるこ

とにより, Runge-Kutta 法を用いてより高精度な構造保存スキームを構築することができる．詳しい構築方法や数値例は, [3] を参照されたい.

5　終わりに

本稿では, 構造保存解法の一種である SAV 法について考察した．SAV 法には, 適用範囲や原理の解明について課題があったが, 本研究では, これらの課題に対する 1 つの回答を与えた．それだけでなく, 勾配系表示 (12) により, 高次のスキームが構築できることもわかった.

しかしながら, 安定性や誤差評価などの数学的な解析に関しては未解決である．実際, KdV 方程式へ適用した場合, 大きな時間刻み幅では不安定性が生じることが数値的にわかっている．特別な場合を除いて, スキームの一意可解性についても明らかではないという課題もある.

このような標準的な理論的解析に関する問題だけでなく, SAV 法特有の問題も残されている．まず, 補助変数を導入する際に用いた実数 a_{L}, a_{U} の選択の仕方にも自由度があり, どのように選ぶのが最適であるかは非自明である．また, そもそも, 書き換えた方程式 (12) が, 元の方程式 (4) と同値であるかどうかも自明ではない．つまり, (4) を知らない状態で, (12) から (4) を導けるのか, という問が未解決である．この点は, 反応拡散方程式に対するオリジナルの SAV 法に対しても考察されていないと思われる．このように, SAV 法に対する理論的解析に関する問題は山積みである．これらは今後の課題である.

謝辞

本研究は科研費 (No. 19K14590) の助成を受けた.

参考文献

[1] C. M. Elliott and A. M. Stuart. The global dynamics of discrete semilinear parabolic equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 30(6):1622–1663, 1993.

[2] D. Furihata. Finite difference schemes for $\partial u/\partial t = (\partial/\partial x)^{\alpha}\delta G/\delta u$ that inherit energy conservation or dissipation property. *J. Comput. Phys.*, 156(1):181–205, 1999.

[3] T. Kemmochi and S. Sato. SAV approach for conservative PDEs with unbounded energy. *in preparation*.

[4] J. Shen and J. Xu. Convergence and error analysis for the scalar auxiliary variable (SAV) schemes to gradient flows. *SIAM J. Numer. Anal.*, 56(5):2895–2912, 2018.

[5] J. Shen, J. Xu, and J. Yang. The scalar auxiliary variable (SAV) approach for gradient flows. *J. Comput. Phys.*, 353:407–416, 2018.

[6] J. Shen and X. Yang. Numerical approximations of Allen-Cahn and Cahn-Hilliard equations. *Discrete Contin. Dyn. Syst.*, 28(4):1669–1691, 2010.

[7] X. Yang. Linear, first and second-order, unconditionally energy stable numerical schemes for the phase field model of homopolymer blends. *J. Comput. Phys.*, 327:294–316, 2016.