

Cahn-Hilliard 方程式に対する ある差分スキームの安定性と収束性について

東大工物工 降籙大介 (Daisuke Furihata)
東大工物工 森 正武 (Masatake Mori)

1. はじめに

2 種類の金属 A と B が一様に混合していたものが次第に分離していくような相分離現象を記述する方程式として Cahn-Hilliard 方程式が知られている. 簡単のために, 現象を 1 次元の空間変数の領域 $\Omega = (a, b)$ で考える. 金属 A の濃度を表す組成分布関数を $u = u(x, t)$ と表すと, Cahn-Hilliard 方程式は次のように書くことができる.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(pu + ru^3 + q \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) \quad (1)$$

ただし, p, q, r は

$$p < 0, q < 0, r > 0 \quad (2)$$

をみたす定数で, $u(x, t)$ は次の二つの境界条件をみたす.

$$\left[\frac{\partial u}{\partial x} \right]_{x=a,b} = 0 \quad (3)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} \left(pu + ru^3 + q \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) \right]_{x=a,b} = 0 \quad (4)$$

この方程式は, 強い非線形項 $\partial^2/\partial x^2(ru^3)$ と負の拡散項 $\partial^2/\partial x^2(pu)$ をもつために, 有限要素法にせよ差分法にせよ, 数値解を計算する場合には時間刻みをはじめとする諸パラメータの選択には細心の注意が要求される [1], [2].

一方, このような物理現象を記述する方程式の多くは, 系の自由エネルギーの変分から導くことができる. したがって, 数値計算を行う場合でも, 系の自由エネルギーを最初に適切に離散化し, さらに適切な離散的変分を実行すれば, 元の物理現象を記述する方程式に対する整合性のある差分スキームが導かれることが期待される.

ここでは, この立場に立ち, 考えている物理系の自由エネルギーから出発する. まず, この自由エネルギーを適切に離散化し, 次に適切な離散的変分を導入する. その際, 微分と積分は適切な差分と和分で近似しなければならない. 「適切な差分と和分」とは, 差分と和分が逆の演算になっていること, 部分積分公式に対応する部分積分公式が自然な形で成立すること, などを意味する. また, 元の自由エネルギーの連続的変分も適切な離散的変分で近似しなければならない. 「適切な離散的変分」とは, その変分によって導かれる差分スキームが元の物理系がもつ重要な物理的性質をそのまま保存するようなものであることを意味する.

この方法に基づいて導出した差分スキームは、元の物理系のもつ様々な物理的性質を保存し、そのことが自動的にスキームの安定性につながることを示される。すなわち、このようにして導出された差分スキームは、自動的に安定なスキームになる。

また、この方法に従えば、Cahn-Hilliard 方程式だけでなく、広い範囲の拡散系の方程式、さらには保存系の方程式に対しても、一般的な手順で安定な差分スキームを導くことができる。

2. 差分作用素と和分作用素の導入

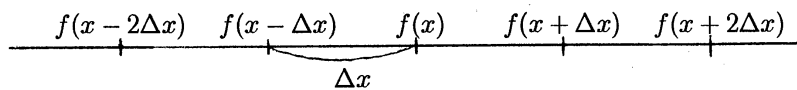
ここに述べる方法は空間が 2 次元および 3 次元の場合にも容易に適用することができるが、説明を簡単にするためにここでは空間変数は 1 次元であるとし、考察の対象とする領域は 1 次元の区間 $\Omega = (a, b)$ であるとする。

[シフト作用素と平均作用素]

微分と積分を差分と和分で適切に近似するために、最初にシフト作用素を定義する。区間 (a, b) を N 等分し、空間変数の刻み幅 Δx は

$$\Delta x = \frac{b-a}{N} = \text{constant} \quad (5)$$

のように定数とする。



そして、独立変数が Δx だけずれた関数値を与えるシフト作用素を、次のように定義する。

$$s^+ f(x) \equiv f(x + \Delta x), \quad s^- f(x) \equiv f(x - \Delta x) \quad (6)$$

また、一つあるいは二つ離れた点における関数値を平均する平均作用素を、シフト作用素を使って次のように定義する。

$$\mu^+ \equiv \frac{1}{2}(s^+ + 1), \quad \mu^- \equiv \frac{1}{2}(s^- + 1), \quad s^{(1)} \equiv \frac{1}{2}(s^+ + s^-) \quad (7)$$

[差分作用素]

差分作用素は、まず 1 階の前進差分 δ^+ と後退差分 δ^- を次のように定義する。

$$\text{前進差分 } \delta^+ f(x) = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (8)$$

$$\text{後退差分 } \delta^- f(x) = \frac{f(x) - f(x - \Delta x)}{\Delta x} \quad (9)$$

そして、中心差分 $\delta^{(1)}$ を次のように定義する。

$$\text{中心差分 } \delta^{(1)} f(x) = \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} \quad (10)$$

2 階差分作用素は次のような中心差分で定義する。

$$\delta^{(2)} f(x) = \frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{(\Delta x)^2} \quad (11)$$

以上定義した 1 階および 2 階の差分作用素を使って、さらに高階の差分作用素を次の関係で定義する。

$$\delta^{(2m+1)} \equiv \delta^{(1)}\delta^{(2m)} \quad (12)$$

$$\delta^{(2m+2)} \equiv \delta^{(2)}\delta^{(2m)} \quad (13)$$

このようにして構成される高階の差分作用素の具体形をまとめると、次のようになる。

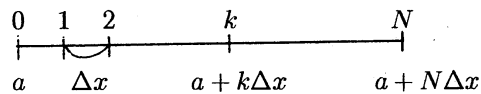
$$\begin{aligned} \delta^{(1)} &= \frac{s^+ - s^-}{2\Delta x} \\ \delta^{(2)} &= \frac{s^+ - 2 + s^-}{(\Delta x)^2} \\ \delta^{(3)} &= \frac{s^{+2} - 2s^+ + 2s^- - s^{-2}}{2(\Delta x)^3} \\ \delta^{(4)} &= \frac{s^{+2} - 4s^+ + 6 - 4s^- + s^{-2}}{(\Delta x)^4} \\ \delta^{(5)} &= \frac{s^{+3} - 4s^{+2} + 5s^+ - 5s^- + 4s^{-2} - s^{-3}}{2(\Delta x)^5} \\ \delta^{(6)} &= \frac{s^{+3} - 6s^{+2} + 15s^+ - 20 + 15s^- - 6s^{-2} + s^{-3}}{(\Delta x)^6} \\ &\dots \end{aligned}$$

これらの差分作用素の誤差は、階数にかかわらず $(\Delta x)^2$ のオーダーであることが示される。なお、以上述べた差分作用素の系列については、すでに古くから知られている [3]。

[和分作用素]

微分と積分は逆作用素の関係にあるから、微分の近似である差分と積分の近似である和分は、逆作用素の関係を保持していることが望ましい。そこでここでは、前項で示した差分作用素といわば相性の良い和分作用素を定義する。

$x = a$ を左端として Δx の幅で離散点を取り、 $x_k = a + k\Delta x$ とする。



また、 $x = a + k\Delta x$ における $f(x)$ の値を f_k とおく。

$$f_k \equiv f(a + k\Delta x), \quad k = 0, 1, \dots, N \quad (14)$$

そして、積分作用素に対応する和分作用素として、ここでは台形則を採用する。

$$\sum_{k=0}^N {}'' f_k \Delta x \equiv \left(\frac{1}{2} f_0 + \sum_{k=1}^{N-1} f_k + \frac{1}{2} f_N \right) \Delta x \quad (15)$$

\sum'' は、和の最初の項と最後の項に $\frac{1}{2}$ を乗ずることを意味する。

[部分積分公式]

われわれは本来の変分を整合性のある離散変分によって近似するわけであるが、変分では部分積分公式が中心的な役割を果たす。そこで、部分積分公式に対応する離散的な部分積分公式を示しておく。これらの公式は、これまでに定義した差分作用素および和分作用素から自然に導かれるものである。

まず、基本的な部分積分公式

$$\int_a^b f(x) \left(\frac{d}{dx} g(x) \right) dx + \int_a^b \left(\frac{d}{dx} f(x) \right) g(x) dx = f(x)g(x) \Big|_a^b \quad (16)$$

に対応して

$$\sum_{k=0}^N {}'' f_k (\delta^{(1)} g_k) \Delta x + \sum_{k=0}^N {}'' (\delta^{(1)} f_k) g_k \Delta x = \frac{1}{2} \left[f_k (s^{(1)} g_k) + (s^{(1)} f_k) g_k \right]_0^N \quad (17)$$

が成り立つ。ここで $f_k = g_k$ とおくと、

$$\sum_{k=0}^N {}'' f_k (\delta^{(1)} f_k) \Delta x = \frac{1}{2} \left[f_k (s^{(1)} f_k) \right]_0^N \quad (18)$$

を得る。なお、境界項に関して次の記号を用いた。

$$\left[p_k \right]_0^N = p_N - p_0 \quad (19)$$

部分積分では、前進差分あるいは後退差分で表現される次の公式も重要な役割を果たす。

$$\sum_{k=0}^N {}'' f_k (\delta^+ g_k) \Delta x + \sum_{k=0}^N {}'' (\delta^- f_k) g_k \Delta x = \frac{1}{2} \left[f_k (s^+ g_k) + (s^- f_k) g_k \right]_0^N \quad (20)$$

次に、1階微分と2階微分の間で成立する部分積分公式

$$\int_a^b \left(\frac{d}{dx} f(x) \right) \left(\frac{d}{dx} g(x) \right) dx + \int_a^b \left(\frac{d^2}{dx^2} f(x) \right) g(x) dx = \left(\frac{d}{dx} f(x) \right) g(x) \Big|_a^b \quad (21)$$

に対応する部分積分公式を考える。われわれの差分作用素は、(12)、(13)によって定義されるために、奇数階と偶数階の形が異なる。したがって、(21)から期待される

$$\sum_{k=0}^N {}'' (\delta^{(1)} u_k) (\delta^{(1)} v_k) + \sum_{k=0}^N {}'' (\delta^{(2)} u_k) v_k \Delta x = \text{境界項}$$

の形の部分積分公式が成立しない。1階微分と2階微分の間で成立する部分積分公式は、次の形になる。

$$\sum_{k=0}^N {}'' \frac{(\delta^+ u_k)(\delta^+ v_k) + (\delta^- u_k)(\delta^- v_k)}{2} \Delta x + \sum_{k=0}^N {}'' (\delta^{(2)} u_k) v_k \Delta x \quad (22)$$

$$= \frac{1}{2} \left[(\delta^+ u_k)(\mu^+ v_k) + (\delta^- u_k)(\mu^- v_k) \right]_0^N \quad (22)$$

$$= \frac{1}{2} \left[(\delta^{(1)} u_k)(s^{(1)} + 1)v_k + (s^{(1)} - 1)u_k(\delta^{(1)} v_k) \right]_0^N \quad (23)$$

ここで, $u_k = v_k$ とおくと,

$$\sum_{k=0}^N \frac{(\delta^+ u_k)^2 + (\delta^- u_k)^2}{2} \Delta x + \sum_{k=0}^N (\delta^{(2)} u_k) u_k \Delta x = \left[(\delta^{(1)} u_k) (s^{(1)} u_k) \right]_0^N \quad (24)$$

を得る.

3. 変分の離散化

前節までに整合性のある差分と和分が定義できたので, 次にこれらの差分と和分を使って離散的分変分法を導入する. われわれは相分離という物理現象を対象としているが, この現象を記述する方程式は考えている系の自由エネルギーの変分から導くことができる. ここでは物理的意味を論ずることはせずに, 相分離現象の局所自由エネルギーが与えられた出発点であるとして議論を行う. なお, ここで述べる方法は相分離問題に適用できるだけでなく, 後に示すように一般の拡散系および保存系の問題に対して適用できるものである.

[相分離現象の自由エネルギーとその変分]

離散的分変分の手順は, 本来の連続的分変分の手順に倣って導くことができる. そこで, 周知の事実であるが, 離散的分変分を導く際の参照とするために, 本来の連続的分変分の手順を示しておこう.

第1節に示した相分離現象の系の局所自由エネルギーは, 空間変数を x とするとき, $x \in \Omega = (a, b)$ に対して

$$G(u) = \frac{1}{2} p u^2 + \frac{1}{4} r u^4 - \frac{1}{2} q \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2, \quad p < 0, q < 0, r > 0 \quad (25)$$

で与えられることがわかっている. 系の全自由エネルギーは, その積分

$$I(u) = \int_a^b G(u) dx \quad (26)$$

で与えられる.

この全自由エネルギーの第1変分は

$$\int_a^b \{G(u + \delta u) - G(u)\} dx \simeq \int_a^b \left(\frac{\delta G}{\delta u} \right) \delta u dx \quad (27)$$

となる. ただし,

$$\frac{\delta G}{\delta u} \equiv p u + r u^3 + q \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (28)$$

である. いまの問題では, 境界条件として(3), (4), すなわち次の2条件が課される.

$$\left[\frac{\partial u}{\partial x} \right]_{x=a,b} = 0 \quad (29)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\delta G}{\delta u} \right) \right]_{x=a,b} = 0 \quad (30)$$

(27), (28) の関係は, 通常の変分の手順によって次のように導くことができる.

$$\int_a^b \{G(u + \delta u) - G(u)\} dx = \int_a^b \left\{ \frac{1}{2} p ((u + \delta u)^2 - u^2) + \frac{1}{4} r ((u + \delta u)^4 - u^4) \right.$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2}q \left\{ \left(\frac{\partial(u + \delta u)}{\partial x} \right)^2 - \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right\} dx \\
& \simeq \int_a^b \left\{ (pu + ru^3)\delta u - q \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial(\delta u)}{\partial x} \right\} dx \\
& = \int_a^b \left\{ pu + ru^3 + q \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right\} \delta u dx - q \frac{\partial u}{\partial x} \delta u \Big|_a^b = \int_a^b \left(\frac{\delta G}{\delta u} \right) \delta u dx \quad (31)
\end{aligned}$$

なお、上の境界条件の下で、(26) を最小にする問題の解が Euler-Lagrange 方程式

$$\frac{\delta G}{\delta u} = 0 \quad (32)$$

をみたすという意味で、(28) の $\frac{\delta G}{\delta u}$ を、変分導関数とよぶ。

[Cahn-Hilliard 方程式]

上で得た変分導関数を用いると、相分離現象の時間変化は、 $\Omega = (a, b)$ において、境界条件(29)、(30) の下で

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{\delta G}{\delta u} \right) \quad (33)$$

によって記述される。すなわち、具体的に(28) を代入すると、Cahn-Hilliard 方程式は

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(pu + ru^3 + q \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) \quad (34)$$

となる。

[離散的局所自由エネルギーと第1変分]

以上の本来の変分法に対応させながら、われわれは離散の変分法を以下のように構成する。 $\Omega = (a, b)$, $b = a + N\Delta x$ において、 $x = a + k\Delta x$, ($k = 0, 1, \dots, N$) における u に対応する離散値を U_k と書く。そして、本来の局所自由エネルギー (25) に対応する離散的局所自由エネルギーを次のように定義する。

$$G_d(U_k) \equiv \frac{1}{2}pU_k^2 + \frac{1}{4}rU_k^4 - \frac{1}{2}q \frac{(\delta^+ U_k)^2 + (\delta^- U_k)^2}{2}, \quad p < 0, q < 0, r > 0 \quad (35)$$

各項の対応は明らかであろう。右辺の最後の項は部分和分の公式(24) を念頭に置いて定義してある。

本来の第1変分は、 u を微小に変化させて $u + \delta u$ とし、 $G(u + \delta u)$ と $G(u)$ の差から(27) のように計算した。それに対して、われわれの離散的第1変分は、 $u + \delta u$ と u でなく、この二つに対応するものを独立に U_k と V_k にとり、次のように計算する。

$$\sum_{k=0}^N \{G_d(U_k) - G_d(V_k)\} \Delta x = \sum_{k=0}^N \left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) (U_k - V_k) \Delta x \quad (36)$$

ここでの離散化変分導関数、すなわち変分差分は、以下に示すように、

$$\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \equiv p \frac{U_k + V_k}{2} + r \frac{U_k^3 + U_k^2 V_k + U_k V_k^2 + V_k^3}{4} + \frac{1}{2} q \delta^{(2)} \frac{U_k + V_k}{2} \quad (37)$$

であることがわかる。 $\frac{\delta G_d}{\delta U_k}$ は U_k だけでなく V_k にも関係していることに注意する必要がある。なお、境界条件 (29), (30) は、それぞれ次のように離散化する。

$$\delta^{(1)}U_k = 0, \quad k = 0, N \quad (38)$$

$$\delta^{(1)}\left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k}\right) = 0, \quad k = 0, N \quad (39)$$

ここで、(37) と (36) の関係は、(24) に注意すれば、次のようにして確かめることができる。

$$\begin{aligned} & \sum_{k=0}^N \{G_d(U_k) - G_d(V_k)\} \Delta x \\ &= \frac{1}{2}p \sum_{k=0}^N (U_k^2 - V_k^2) \Delta x + \frac{1}{4}r \sum_{k=0}^N (U_k^4 - V_k^4) \Delta x \\ & \quad - \frac{1}{2}q \sum_{k=0}^N \left\{ \frac{(\delta^+ U_k)^2 - (\delta^+ V_k)^2}{2} + \frac{(\delta^- U_k)^2 - (\delta^- V_k)^2}{2} \right\} \Delta x \\ &= \frac{1}{2}p \sum_{k=0}^N (U_k + V_k)(U_k - V_k) \Delta x \\ & \quad + \frac{1}{4}r \sum_{k=0}^N (U_k^3 + U_k^2 V_k + U_k V_k^2 + V_k^3)(U_k - V_k) \Delta x \\ & \quad - \frac{1}{2}q \sum_{k=0}^N \left\{ \frac{\delta^+(U_k + V_k)\delta^+(U_k - V_k)}{2} + \frac{\delta^-(U_k + V_k)\delta^-(U_k - V_k)}{2} \right\} \Delta x \\ &= \frac{1}{2}p \sum_{k=0}^N (U_k + V_k)(U_k - V_k) \Delta x \\ & \quad + \frac{1}{4}r \sum_{k=0}^N (U_k^3 + U_k^2 V_k + U_k V_k^2 + V_k^3)(U_k - V_k) \Delta x \\ & \quad + \frac{1}{2}q \sum_{k=0}^N \{ \delta^{(2)}(U_k + V_k) \} (U_k - V_k) \Delta x \\ & \quad - \frac{1}{2}q \left[\delta^{(1)}(U_k + V_k)(s^{(1)} + 1)(U_k - V_k) \right. \\ & \quad \left. + (s^{(1)} - 1)(U_k + V_k)\delta^{(1)}(U_k - V_k) \right]_0^N \quad (40) \end{aligned}$$

U_k, V_k ともに境界条件 (38) をみたすので (37), (36) の関係を得る。

なお、(37), (36) の関係は、周期的境界条件の下でも成立する。

また、Cahn-Hilliard 方程式の場合の離散的局所自由エネルギーの多項式の部分を

$$F(U_k) = \frac{1}{2}pU_k^2 + \frac{1}{4}rU_k^4 \quad (41)$$

とおくと、離散的局所自由エネルギーは

$$G_d(U_k) = F(U_k) - \frac{1}{2}q \frac{(\delta^+ U_k)^2 + (\delta^- U_k)^2}{2} \quad (42)$$

と書くことができる. このように書くと, 変分差分は

$$\frac{\delta G_d}{\delta U_k} = \frac{F(U_k) - F(V_k)}{U_k - V_k} + \frac{1}{2}q\delta^{(2)}(U_k + V_k) \quad (43)$$

と表すことができる.

本来の第1変分 (27) の両辺が \simeq で結ばれているのに対して, われわれの離散的な第1変分 (36) の両辺が等号 $=$ で結ばれていることに注意されたい. この事実が, われわれのスキームの数学的解析を確実なものにしているのである.

[離散的 Cahn-Hilliard 方程式]

以上の離散化より, 離散的 Cahn-Hilliard 方程式が次のようにして導かれる. まず, 時間を刻み幅 Δt で離散化し, 時刻 $t = m\Delta t$, 点 $x = a + k\Delta x$ における $u(x, t)$ の差分による近似値を $U_k^{(m)}$ と書く. そして, 時間微分 $\frac{\partial u}{\partial t}$ を時間差分

$$\frac{U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)}}{\Delta t} \quad (44)$$

で近似し, (34) の左辺をこの時間差分で, 右辺の $\frac{\delta G}{\delta u}$ を (37) で置き換える. こうして, $\Omega = (a, b)$, $b = a + N\Delta x$ において, 境界条件 (38), (39) の下での次の離散化 Cahn-Hilliard 方程式を得る.

$$\frac{U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)}}{\Delta t} = \delta^{(2)} \left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) \quad (45)$$

ここで $\frac{\delta G_d}{\delta U_k}$ については, (37) において U_k を $U_k^{(m+1)}$, V_k を $U_k^{(m)}$ とおいて,

$$\begin{aligned} \frac{\delta G_d}{\delta U_k} &= \frac{1}{2}p \left(U_k^{(m+1)} + U_k^{(m)} \right) \\ &\quad + \frac{1}{4}r \left(U_k^{(m+1)3} + U_k^{(m+1)2}U_k^{(m)} + U_k^{(m+1)}U_k^{(m)2} + U_k^{(m)3} \right) \\ &\quad + \frac{1}{2}q\delta^{(2)} \left(U_k^{(m+1)} + U_k^{(m)} \right) \end{aligned} \quad (46)$$

とする. (45) の右辺は非線形であるから, 実際の計算では, $m = 0$ の初期時刻から出発して $m = 1, 2, 3, \dots$ の各時間ステップで適当な反復解法を適用する必要がある.

[時間経過によるエネルギーの減少]

いま考えている相分離問題の系は, 系の全エネルギーが時間とともに減少する, いわゆる拡散系である. 実際, 系の全エネルギー (26) を時間 t で微分することにより, 次のようにしてそれを確かめることができる.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_a^b G(u) dx &= \int_a^b \frac{\delta G}{\delta u} \frac{\partial u}{\partial t} dx = \int_a^b \frac{\delta G}{\delta u} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{\delta G}{\delta u} \right) dx \\ &= \left[\frac{\delta G}{\delta u} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta G}{\delta u} \right]_a^b - \int_a^b \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta G}{\delta u} \right)^2 dx = - \int_a^b \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta G}{\delta u} \right)^2 dx \leq 0 \end{aligned} \quad (47)$$

われわれの離散化系の全エネルギーも、拡散系として満たすべき対応する性質をもつ。すなわち、(36)において $U_k = U_k^{(m+1)}$, $V_k = U_k^{(m)}$ とおくと、(47)に対応して、

$$\frac{1}{\Delta t} \sum_{k=0}^N \left\{ G_d(U_k^{(m+1)}) - G_d(U_k^{(m)}) \right\} \Delta x < 0 \quad (48)$$

が成立することが次のようにして示される。

$$\begin{aligned} \text{左辺} &= \sum_{k=0}^N \left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) \frac{U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)}}{\Delta t} \Delta x = \sum_{k=0}^N \left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) \delta^{(2)} \left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) \Delta x \\ &= - \sum_{k=0}^N \frac{1}{2} \left\{ \left(\delta^+ \left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) \right)^2 + \left(\delta^- \left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) \right)^2 \right\} \Delta x \\ &\quad + \left[\delta^{(1)} \left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) \mu^{(1)} \left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) \right]_0^N \\ &\quad \text{境界条件(39)より境界項は0になり} \\ &= - \sum_{k=0}^N \frac{1}{2} \left\{ \left(\delta^+ \left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) \right)^2 + \left(\delta^- \left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) \right)^2 \right\} \Delta x \leq 0 \quad (49) \end{aligned}$$

この事実が、われわれのスキームの安定性、ひいては収束性につながるのである。それについては別の機会に述べる。

4. 一般の拡散系および保存系への応用

前節に述べた方法は、相分離問題に限らず、拡散系および保存系の問題に一般的な形で応用できる。われわれの離散的な第1変分は(36)で定義される。ここで、 $G_d(u)$ として、対象としている物理系の局所自由エネルギーに相当するものをとれば、直ちにその変分差分 $\frac{\delta G_d}{\delta U_k}$ を経由して、整合性のある安定な差分スキーム(45)が得られる。

[拡散系への応用]

最も単純な拡散方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (50)$$

の場合、離散的局所自由エネルギーは

$$G_d(U_k) = \frac{1}{2} U_k^2 \quad (51)$$

ととればよい。このとき、変分差分は

$$\frac{\delta G_d}{\delta U_k} = \frac{G_d(U_k) - G_d(V_k)}{U_k - V_k} = \frac{\frac{1}{2} U_k^2 - \frac{1}{2} V_k^2}{U_k - V_k} = \frac{U_k + V_k}{2} \quad (52)$$

となり、(45)より拡散方程式に対する整合性のある差分スキーム

$$\frac{U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)}}{\Delta t} = \delta^{(2)} \left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right), \quad \frac{\delta G_d}{\delta U_k} = \frac{U_k^{(m+1)} + U_k^{(m)}}{2}, \quad (53)$$

すなわち

$$\frac{U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)}}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left[\frac{U_{k+1}^{(m+1)} - 2U_k^{(m+1)} + U_{k-1}^{(m+1)}}{(\Delta x)^2} + \frac{U_{k+1}^{(m)} - 2U_k^{(m)} + U_{k-1}^{(m)}}{(\Delta x)^2} \right] \quad (54)$$

が導かれる。これはよく知られた Crank-Nicholson スキームに他ならない。

課すべき境界条件は, (49) より

$$\left[\delta^{(1)} \left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) s^{(1)} \left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) \right]_0^N = 0 \quad (55)$$

であり, Dirichlet 条件

$$s^{(1)} U_k^{(m)} = 0, \quad k = 0, N \quad (56)$$

または Neumann 条件

$$\delta^{(1)} U_k^{(m)} = 0, \quad k = 0, N \quad (57)$$

のいずれかが成り立てば(55) が成り立つ。

時間経過とともに全エネルギーが減少すること, すなわち,

$$\frac{1}{\Delta t} \sum_{k=0}^N \left\{ G_d(U_k^{(m+1)}) - G_d(U_k^{(m)}) \right\} \Delta x \leq 0 \quad (58)$$

が成立することも (49) と同様にして確かめられる。

[保存系への応用]

系の全自由エネルギーがつねに保存されるいわゆる保存系の場合にも, ここでの考え方を適用することができる。最も簡単な場合として, 波動方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial x} \quad (59)$$

を考えると, この場合にも離散的局所自由エネルギーは

$$G_d(U_k) = \frac{1}{2} U_k^2 \quad (60)$$

ととればよい。このとき, 変分差分は(52) と同様に

$$\frac{\delta G_d}{\delta U_k} = \frac{U_k + V_k}{2} \quad (61)$$

となる。保存系の場合の方程式は, 空間微分は(33) のように2階ではなく1階で, すなわち

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\delta G}{\delta u} \right) \quad (62)$$

で与えられる。これに対応する保存系の離散化方程式は

$$\frac{U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)}}{\Delta t} = \delta^{(1)} \left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) \quad (63)$$

であり、課すべき境界条件は

$$\frac{1}{2} \left[\left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) s^{(1)} \left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) \right]_0^N = 0 \quad (64)$$

である。

具体的に (61) を代入すると、波動方程式に対する整合性のある差分スキーム

$$\frac{U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)}}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left[\frac{U_{k+1}^{(m+1)} - U_{k-1}^{(m+1)}}{2\Delta x} + \frac{U_{k+1}^{(m)} - U_{k-1}^{(m)}}{2\Delta x} \right] \quad (65)$$

が導かれる。また、具体的な境界条件は

$$U_k^{(m)} = 0 \quad (\text{または } s^{(1)} U_k^{(m)} = 0), \quad k = 0, N \quad (66)$$

となる。この条件が成り立てば (64) が成り立つ。

保存系の場合に系の全自由エネルギーが時間経過にかかわらず保存されること、すなわち

$$\frac{1}{\Delta t} \sum_{k=0}^N \{ G_d(U_k^{(m+1)}) - G_d(U_k^{(m)}) \} \Delta x = 0 \quad (67)$$

が成立することが、(18) を用いて次のようにして示される。

$$\begin{aligned} \text{左辺} &= \sum_{k=0}^N \left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) \frac{U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)}}{\Delta t} \Delta x \\ &= \sum_{k=0}^N \left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) \delta^{(1)} \left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) \Delta x = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) s^{(1)} \left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) \right]_0^N \end{aligned} \quad (68)$$

境界条件 (64) より最後の項は 0 になり、(67) を得る。

[KdV 方程式への応用]

保存系のもう一つの例として、KdV 方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \quad (69)$$

についてその差分スキームを導いてみよう。KdV 方程式の場合の局所自由エネルギーは

$$G(u) = \frac{1}{6} u^3 - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \quad (70)$$

である。これに対応して、離散的局所自由エネルギーは

$$G_d(U_k) = \frac{1}{6} U_k^3 - \frac{1}{2} \times \frac{(\delta^+ U_k)^2 + (\delta^- U_k)^2}{2} \quad (71)$$

ととればよい。このとき、離散的第 1 変分

$$\sum_{k=0}^N \{ G_d(U_k) - G_d(V_k) \} \Delta x = \sum_{k=0}^N \left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) (U_k - V_k) \Delta x \quad (72)$$

における $\frac{\delta G_d}{\delta U_k}$ を計算すると,

$$\frac{\delta G_d}{\delta U_k} = \frac{U_k^2 + U_k V_k + V_k^2}{6} + \delta^{(2)} \frac{U_k + V_k}{2} \quad (73)$$

となる. ここで, 境界条件は周期的条件を満たすものとする. こうして, (73) を (63) に代入すれば, KdV 方程式に対する整合性のある差分スキームが次のように得られる.

$$\frac{U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)}}{\Delta t} = \delta^{(1)} \left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) \quad (74)$$

$$\frac{\delta G_d}{\delta U_k} = \frac{U_k^{(m+1)2} + U_k^{(m+1)} U_k^{(m)} + U_k^{(m)2}}{6} + \delta^{(2)} \frac{U_k^{(m+1)} + U_k^{(m)}}{2} \quad (75)$$

KdV 方程式の場合にも, 系の全自由エネルギーが時間経過にかかわらず保存されること, すなわち

$$\frac{1}{\Delta t} \sum_{k=0}^N \left\{ G_d(U_k^{(m+1)}) - G_d(U_k^{(m)}) \right\} \Delta x = 0 \quad (76)$$

が成立することが, (18) を用いて次のようにして示される.

$$\begin{aligned} \text{左辺} &= \sum_{k=0}^N \left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) \frac{U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)}}{\Delta t} \Delta x = \sum_{k=0}^N \left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) \delta^{(1)} \left(\frac{\delta G_d}{\delta U_k} \right) \Delta x \\ &= 0 \quad (\text{周期的境界条件より}) \end{aligned} \quad (77)$$

表題の安定性と収束性の詳細な議論は別の機会に述べたい.

参考文献

- [1] Elliott, C. M. and French, D. A., Numerical studies of the Cahn-Hilliard equation for phase separation, IMA J. Appl. Math, **38** (1987), 97-128.
- [2] 降旗大介, 恩田智彦, 森正武, Cahn-Hilliard 方程式の差分法による数値解析, 日本応用数学会論文誌, **3** (1993), 217-228.
- [3] 森口繁一, 高田勝, 数値計算法 II p.58, 応用数学講座, 岩波書店, 1958.