

Allen-Cahn 方程式の数値解に対する漸近的な誤差解析

東京大学大学院数理科学研究科 剣持 智哉*

Tomoya Kemmochi

The Graduate School of Mathematical Sciences,
The University of Tokyo

1 問題意識

本稿では、領域 $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ 上の Allen-Cahn 方程式

$$\begin{cases} \partial_t u = \Delta u - \frac{1}{\varepsilon^2} f(u), & \text{in } \Omega \times (0, T), \\ \partial_n u = 0, & \text{on } \partial\Omega \times (0, T), \\ u(0) = u_0, & \text{in } \Omega \end{cases} \quad (1)$$

を考える。ただし、 $\varepsilon > 0$ はパラメータ、 $f(u) = u^3 - u$ であり、 $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ($d \in \mathbb{N}$), $T > 0$, $u_0 \in C^0(\Omega)$ である。初期関数 u_0 は ε に依存しても良いものとする。したがって、本来は $u_{0,\varepsilon}$ などと表記すべきであるが、混乱の恐れがない限りは u_0 と表記する。

よく知られているように、Allen-Cahn 方程式 (1) は界面の運動を表す方程式 (平均曲率流方程式) のある種の近似方程式 (すなわち、フェーズフィールドモデル) の一種である。実際、初期関数が $\|u_0\|_{L^\infty} \leq 1$ を満たす場合、最大値原理によって任意の時刻において $\|u(t)\|_{L^\infty(\Omega)} \leq 1$ が成り立ち、領域 Ω の大部分が $\{u(\cdot, t) \approx 1\}$ と $\{u(\cdot, t) \approx -1\}$ という 2 つの部分領域に分かれ、界面に対応する領域 $\{u(\cdot, t) \approx 0\}$ の測度が $O(\varepsilon)$ 程度となる、ということが知られており、この定理は相分離現象に対応している [1]。ただし、この表記はあくまで直観的な表記であるということに注意されたい。

本稿では、方程式 (1) の数値計算について考察したい。パラメータ ε は界面の“幅”に対応するため、空間変数に関するメッシュのサイズを h とするとき、 $h \ll \varepsilon$ でないと数値計算がうまくいかないということは、容易に予想されることであろう。実際、簡単な差分法でこのことを検証してみると、 $h > \varepsilon$ のときは、数値解がほとんど動かないということが観察される (図 1)。また、 ε が界面の“幅”を表していることに鑑みると、 ε は小さいということが仮定される。すなわち、 h はさらに小さく取らなければならないのだが、計算コスト、あるいは計算リソースの制限などの観点から、 h はあ

* Email: kemmochi@ms.u-tokyo.ac.jp

まり小さく取りすぎることはできないはずである。したがって、「どの程度まで h を大きく取ってもよいか？」という問題が生じる。

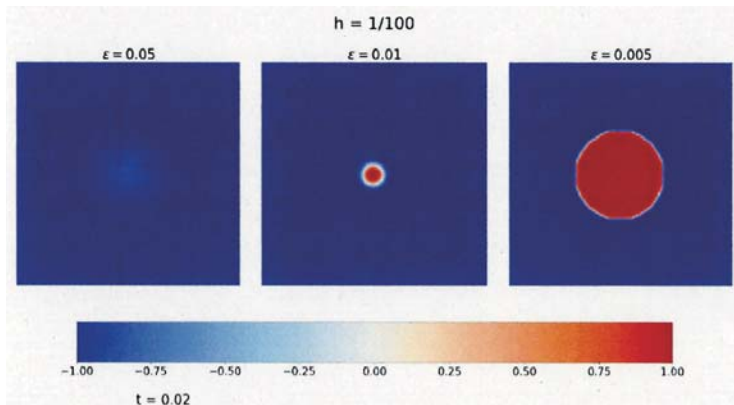


図1 メッシュサイズ h を $h = 0.01$ に固定し、パラメータ ϵ を変化させた際の、数値解の挙動の違い。左から、 $\epsilon = 0.05, 0.01, 0.005$ である。いずれも初期関数としてはレベルセットが円となるものを用いており、時刻 $t = 0.02$ における様子を図示している。

本稿では、以上で述べたような、パラメータ ϵ とメッシュサイズ h との関係性について考察する。具体的には、

- (1) $h \gg \epsilon$ において、数値解が「動かない」のはなぜなのか？ これはいつ起こるのか？
- (2) 適切な数値計算のためには、 h を ϵ に対してどの程度まで大きく取ることが許されるのか？

という2つの問題について述べる。しかしながら、後者については、著者の力不足により、新たな数学的知見は得られていない。にもかかわらず本稿を提出するのは、先行研究においてどのような問題点があるのか、という点を述べることで、問題意識の共有を図るためである。このような中途半端な報告になってしまうことをご容赦いただきたい。なお、本稿を通じて、空間変数のみの半離散化を考察する。これは、先に述べたように、空間変数に関する2つのスケールの関係性を調べたいからである。時間変数の離散化に関しても、時間スケールの選び方によっては同様の問題が発生するが、それは今後の課題である。

2 背景

この節では、先行研究をいくつか紹介することで、どこまでが明らかになっているのかという点について述べる。まずは、誤差評価のための十分条件を考察している文献を2つ紹介する。Allen-Cahn 方程式に対する数値解析の論文で最も良い成果は、著者の知る限り、Feng と Prohl による結果 [4] であると思われる。この文献には具体的数値は書かれていないのだが、具体例として書かれている数値を代入すると、最適な収束オーダーを得るための最も緩い十分条件は、 $h = O(\epsilon^{7/2})$

である、という結論になると思われる。しかし、これは 2 次元の場合であり、3 次元の場合には、より厳しい条件が要求される。また、[5] においては、二重障害物問題というやや異なる問題ではあるものの、Allen-Cahn 方程式と類似のフェーズフィールド問題に対して、 $h = O(\varepsilon^{3/2})$ と取れば誤差評価のためには十分であり、より良い収束オーダーを得るためには、 $h = O(h^2)$ と取れば十分である、という結論を導いている。これらの結果は (h について) 最適なオーダーの誤差評価を与えているという点で重要であるが、条件としてはやや強いように思われる。方程式 (1) は放物型方程式であるから、時間の離散化手法次第では、時間刻み幅 Δt は $\Delta t \leq O(h^2)$ と取る必要があり、その場合、[4] の条件では、 $\Delta t \leq O(\varepsilon^7)$ としなければならなくなってしまう。実際、[4] では、 $\Delta t + h^2$ に対する条件を導いている。

我々の問題意識と近い研究としては、[3] が挙げられる。これは対応するエネルギー汎関数の Γ 極限を考察しており、 $h = O(\varepsilon)$ の場合を境界として、離散的な汎関数が異なる汎関数に Γ 収束することが示されている。ここで、 Γ 収束とは、汎関数の列に対する収束の概念であり、大域最適解の収束に関する情報を与える [2]。しかしながら、対応する勾配流 (つまり、方程式 (1) を離散化した問題) の挙動は不明である。ただし、 Γ 収束と対応する勾配流に関する研究もいくらか存在する (例えば、[6]) ため、これらの手法を用いることで何か情報を引き出せる可能性は残っている。

十分条件に関する研究はこのようにある程度の蓄積があるのだが、必要条件を考察している文献は、著者の知る限り存在していないようである。しかしながら、既に述べたように、メッシュサイズをあまり大きく取れない可能性がある以上、「これより大きく取ってはいけない」という上限を導出することは重要であり、また、先の数値例で見たように、数値解が止まってしまうという“現象”はそれ自身が興味深い。そこで、次の節では必要条件について考察する。

3 必要条件

既に述べたように、方程式 (1) に対する数値解析においては、メッシュに対する十分条件ばかりが研究されてきた。もちろん、実用上は重要な条件であるということ間違いないのだが、一方で、現在知られている条件は、特に 3 次元の問題において、強すぎる条件であるという懸念がある。そこで、十分条件ではなく、必要条件を与えることを考える。すなわち、「これよりメッシュを粗くしてしまうと、方程式 (1) に対する数値計算がうまくいかない」という条件を与える。

ここでは簡単のため、2 次元矩形領域上の差分法を考える。すなわち、 $\Omega = (0, 1)^2 \subset \mathbb{R}^2$ とし、 $M \in \mathbb{N}$ に対して、各辺を M 等分したメッシュを考える。多重指数 $i = (i_1, i_2) \in \mathbb{Z}^2$ に対し、

$$x_i := \left(i - \frac{1}{2}\right) h, \quad C_i := \{x \in \Omega \mid \|x - x_i\|_{l^\infty} < h/2\}$$

とおく。ただし、 $h = 1/M$ であり、 $\|\cdot\|_{l^\infty}$ は $\mathbb{R}^2$ における最大値ノルムである。各セル C_i の特性関数を χ_i とおき、区分定数関数の空間を

$$V_h := \text{span}\{\chi_i\}_{i \in \{1, \dots, M\}^2}$$

とおく。

上記の記号の下で、問題 (1) に対して、次のような差分スキームを考察する：

$$\begin{cases} \partial_t u_i^\varepsilon = \Delta_h u_i^\varepsilon - \frac{1}{\varepsilon^2} f(u_i^\varepsilon), & t \in (0, T), i \in \{1, \dots, M\}^2, \\ u_{(0,j)}^\varepsilon = u_{(1,j)}^\varepsilon, \quad u_{(M+1,j)}^\varepsilon = u_{(M,j)}^\varepsilon, & t \in (0, T), j \in \{1, \dots, M\}, \\ u_{(j,0)}^\varepsilon = u_{(j,1)}^\varepsilon, \quad u_{(j,M+1)}^\varepsilon = u_{(j,M)}^\varepsilon, & t \in (0, T), j \in \{1, \dots, M\}, \\ u_i^\varepsilon|_{t=0} = u_0(x_i), & i \in \{1, \dots, M\}^2. \end{cases} \quad (2)$$

ただし、 $u_i^\varepsilon = u_i^\varepsilon(t)$ は未知関数であり、 Δ_h は 2 階の中心差分作用素

$$\Delta_h u_i^\varepsilon := \sum_{e \in \mathbb{Z}^2, |e|=1} \frac{u_{i+e}^\varepsilon - u_i^\varepsilon}{h^2}$$

である。標準的な手法に則り、Neumann 境界条件を、領域の外側に仮想的なセルを導入することで処理している。この方程式の解を $u_h^\varepsilon = \sum_i u_i^\varepsilon \chi_i \in C([0, T]; V_h)$ とおく。

さて、図 1 の $h > \varepsilon$ のケースにおいて、数値解はほとんど変化しないのであった。これは、隣接するセル間での (拡散による) 相互作用がほとんど生じていない、すなわち、セルごとに独立して常微分方程式のように振る舞っていると考えられる。そこで、以下の常微分方程式を導入し、その解を $v_h^\varepsilon = \sum_i v_i^\varepsilon \chi_i \in C([0, T]; V_h)$ とおく：

$$\begin{cases} \partial_t v_i^\varepsilon = -\frac{1}{\varepsilon^2} f(v_i^\varepsilon), & t \in (0, T), i \in \{1, \dots, M\}^2, \\ v_i^\varepsilon|_{t=0} = u_0(x_i), & i \in \{1, \dots, M\}^2. \end{cases} \quad (3)$$

このとき、次の結果を得た。

定理 1. 次を仮定する： h と ε に依存しない定数 $c_0 > 0$ であって、

$$f'(u_0(x_i)) \geq c_0, \quad \forall i \in \{1, \dots, M\}^2 \quad (4)$$

を満たすものが存在する。また、初期関数 u_0 は、 $\|u_0\|_{L^\infty(\Omega)} \leq 1$ を満たすと仮定する。このとき、 ε/h が十分小さければ、

$$\|u_h^\varepsilon(t) - v_h^\varepsilon(t)\|_{L^\infty(\Omega)} \leq C \left(\frac{\varepsilon}{h} \right)^2, \quad \forall t \in (0, T) \quad (5)$$

が成り立つ。ただし、 C は c_0 (と f, d) のみに依存する定数であり、 h, ε, t, T には依存しない。□

注意 1. いくつか注意を述べておく。

- 条件 (4) は技術的な仮定であるが、非現実的なものではない。例えば、初期関数 u_0 が “well-prepared” な関数 [1] であって、 $h = o(\varepsilon)$ であるならば、(測度論的に) ほとんどの場合で条件 (4) が成り立つ。この条件を外しても同様の結果が得られると予想しているが、証明はできていない。
- 誤差評価 (5) の ε/h に関するオーダーが最適であるかどうかは不明である。

- 本稿では常に $f(u) = u^3 - u$ としているが, ある程度の滑らかさなどの仮定の下で, 一般化が可能である.

定理 1 の証明. 上で定義した作用素 Δ_h を, 空間 V_h 上の線形作用素とみなし, 同じ記号 Δ_h で記述する. すなわち, $v_h = \sum_i v_i \chi_i \in V_h$ に対して, $\Delta_h v_h = \sum_i (\Delta_h v_i) \chi_i$ と書く. 境界に接するセル上においては, 問題 (2) と同様に仮想的なセルを用いて $\Delta_h v_i$ を定義する. また, $w_h^\varepsilon := u_h^\varepsilon - v_h^\varepsilon \in C^0([0, T]; V_h)$ とおく.

さて, w_h^ε が満たす方程式を考えると, 以下のようになっている.

$$\begin{cases} \partial_t w_i^\varepsilon = \left(\Delta_h - \frac{\alpha c_0}{\varepsilon^2} \right) w_i^\varepsilon + \frac{\alpha c_0 - (3|v_i^\varepsilon|^2 - 1)}{\varepsilon^2} w_i^\varepsilon - \frac{3v_i^\varepsilon |w_i^\varepsilon|^2 + |w_i^\varepsilon|^3}{\varepsilon^2} + \Delta_h v_i^\varepsilon, & \forall i, \\ w_i^\varepsilon(0) = 0. \end{cases} \quad (6)$$

ここで, $\alpha > 0$ は任意定数であり, 後で適切な値に固定する. 残差項を

$$R_i(w_h^\varepsilon) = \frac{\alpha c_0 - (3|v_i^\varepsilon|^2 - 1)}{\varepsilon^2} w_i^\varepsilon - \frac{3v_i^\varepsilon |w_i^\varepsilon|^2 + |w_i^\varepsilon|^3}{\varepsilon^2} + \Delta_h v_i^\varepsilon$$

とおき, $R_h(w_h^\varepsilon)(s) := \sum_i R_i(w_h^\varepsilon)(s) \chi_i$ とおく. このとき, 誤差 w_h^ε は以下のように表示される:

$$w_h^\varepsilon(t) = \int_0^t e^{(t-s)(\Delta_h - \alpha c_0/\varepsilon^2)} R_h(w_h^\varepsilon)(s) ds. \quad (7)$$

ただし, $e^{t(\Delta_h - \alpha c_0/\varepsilon^2)}$ は, 作用素 $\Delta_h - \alpha c_0/\varepsilon^2$ が V_h 上で生成する半群である. そこで, 写像 $\Phi: C^0([0, T]; V_h) \rightarrow C^0([0, T]; V_h)$ を

$$(\Phi \psi_h)(t) := \int_0^t e^{(t-s)(\Delta_h - \alpha c_0/\varepsilon^2)} R_h(\psi_h)(s) ds$$

で定義し, $\delta \in [0, 1]$ に対して

$$B_{h,\delta} := \{\psi_h \in C^0([0, T]; V_h) \mid \psi_h(0) = 0, \|\psi_h\|_{L^\infty(\Omega \times (0, T))} \leq \delta\}$$

とおく. このとき, 適切な α と δ に対して, Φ が $B_{h,\delta}$ 上の縮小写像になることを示す.

そのために, 基礎的な事項を確認しておく. まず, 半群 $e^{t\Delta_h}$ は, 正値性を保存する (すなわち, 最大値原理が成り立つ) ことが知られている. 特に, 最大値ノルムの下で縮小半群となる. さらに, 初期値に対する仮定と最大値原理により, $\|u_h^\varepsilon(t)\|_{L^\infty(\Omega)} \leq 1$ である. また, 常微分方程式の一般論により, $\|v_h^\varepsilon(t)\|_{L^\infty(\Omega)} \leq 1$ でもあるため, $\|w_h^\varepsilon(t)\|_{L^\infty(\Omega)} \leq 2$ がわかる. 最後に, $|v_i^\varepsilon| \nearrow 1$ ($t \nearrow \infty$) もわかるため, 仮定 (4) により,

$$c_0 \leq f'(u_0(x_i)) = 3|u_0(x_i)|^2 - 1 \leq 3|v_i^\varepsilon|^2 - 1 \leq 2$$

である. 特に,

$$|\alpha c_0 - (3|v_i^\varepsilon|^2 - 1)| \leq \max\{|\alpha - 1|c_0, |\alpha c_0 - 2|\} =: \beta$$

である。以下では、 $\alpha = 1/2 + 1/c_0$ とおく。このとき、

$$\frac{\beta}{\alpha c_0} = \frac{2 - c_0}{2 + c_0} < 1 \quad (8)$$

であることに注意しておく。

さて、 Φ が縮小写像になるような α, δ を定めよう。以下では、 C と書いたら h, δ, α, c_0 に依存しない定数を意味する。まずは、 $\psi_h \in B_{h,\delta}$ に対して $\Phi\psi_h$ を評価すると、

$$\begin{aligned} \|\Phi\psi_h(t)\|_{L^\infty(\Omega)} &\leq \int_0^t e^{-(t-s)\alpha c_0/\varepsilon^2} \left(\frac{\beta}{\varepsilon^2} \delta + \frac{C}{\varepsilon^2} \delta^2 + \frac{C}{h^2} \right) ds \\ &\leq \frac{\beta}{\alpha c_0} \delta + C \left(\frac{1}{\alpha c_0} \delta^2 + \frac{\varepsilon^2}{h^2} \right) \end{aligned}$$

である。次に、 $\psi_1, \psi_2 \in B_{h,\delta}$ に対して、 $\Phi\psi_1 - \Phi\psi_2$ を評価する。この関数を計算すると、

$$(\Phi\psi_1 - \Phi\psi_2)(t) = \int_0^t e^{(t-s)(\Delta_h - \alpha c_0/\varepsilon^2)} \left[\frac{\alpha c_0 - (3|v_h^\varepsilon|^2 - 1)}{\varepsilon^2} (\psi_1 - \psi_2) - \frac{R'}{\varepsilon^2} (\psi_1 - \psi_2) \right] ds \quad (9)$$

である。ただし、 $R' := 3v_h^\varepsilon(\psi_1 + \psi_2) + (\psi_1^2 + \psi_1\psi_2 + \psi_2^2)$ とおいた。したがって、

$$\begin{aligned} \|(\Phi\psi_1 - \Phi\psi_2)(t)\|_{L^\infty(\Omega)} &\leq \int_0^t e^{-(t-s)\alpha c_0/\varepsilon^2} \left(\frac{\beta}{\varepsilon^2} + C \frac{\delta}{\varepsilon^2} \right) \|\psi_1(s) - \psi_2(s)\|_{L^\infty(\Omega)} ds \\ &\leq \left(\frac{\beta}{\alpha c_0} + \frac{C}{\alpha c_0} \delta \right) \|\psi_1 - \psi_2\|_{L^\infty(\Omega \times (0,T))} \end{aligned} \quad (10)$$

そこで、 $\delta := \varepsilon/h$ とおき、 ε/h を十分小さくする（ただし上界は c_0 のみに依存）と、(8), (9), (10) により、 Φ が $B_{h,\delta}$ 上の縮小写像となることがわかる。

したがって、 Φ は $B_{h,\delta}$ 内にただ 1 つの不動点を持つ。方程式 (6) の解の一意性と表示公式 (7) から、この不動点は w_h^ε に他ならないということがわかる。すなわち、 $w_h^\varepsilon \in B_{h,\delta}$ であることがわかり、これにより、所望の不等式 (5) を得る。□

4 数値例

4.1 必要条件について

まずは、メッシュが粗い場合の誤差評価 (5) の、 ε/h に関するオーダーについて数値的に調べた結果を報告する。2 次元正方形領域上で問題 (2) を解き、常微分方程式 (3) の解との誤差を計算する。ただし、問題 (2) の数値解を得るためには時間変数の離散化が必要であるが、十分小さな時間刻み幅における Runge-Kutta 法による数値解を用いた。同様に、(3) の厳密解の代わりに、同じ Runge-Kutta 法による数値解を用いた。メッシュ幅 h と、パラメータ ε を変化させて、これらの問題を数値計算した。初期関数としては、セルごとに乱数を与えて構成した。ただし、乱数の絶対値は、区間 $[0.5, 1]$ に収まるようにした。各 h と ε の組に対して、10 個の初期関数を用いて数値計算をし、誤差の平均値をプロットしたものが、図 2 である。横軸には ε/h を、縦軸には $L^\infty(\Omega)$ ノルムに

よる誤差をプロットしている. いくつかのマーカーが重なって見えるのは, 比率 ε/h が同じであっても, (h, ε) の組が異なっている場合があるからである. この結果によると, 不等式評価 (5) は, 比率 ε/h に対しては最良オーダーであると予測される.

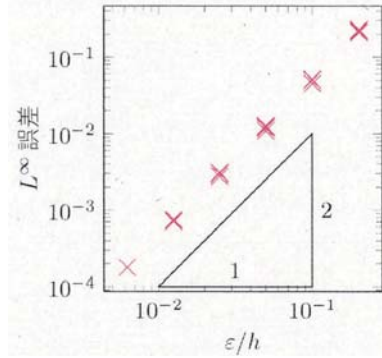


図2 h と ε の比率を変化させた際の, 常微分方程式の解との誤差のプロット.

4.2 メッシュが細かすぎる場合

ここでは少し視点を変えて, 平均曲率流の近似問題としての Allen-Cahn 方程式に着目する. 平均曲率流の厳密解として, 半径 0.2 の円を初期形状とする運動を考える. このとき, この曲線は, 時刻 $T_0 := 0.02$ において 1 点に収縮し, 曲線の運動としては爆発する. 一方で, 関数

$$u_0(x, y) = \tanh\left(\frac{\pi}{\varepsilon}(0.2 - \sqrt{(x-0.5)^2 + (y-0.5)^2})\right), \quad (x, y) \in \mathbb{R}^2$$

を初期関数とする領域 $(0, 1)^2$ 上の Allen-Cahn 方程式 (1) を考えると, そのレベルセット $\Gamma^\varepsilon(t) = \{(x, y) \in (0, 1)^2 \mid u^\varepsilon(x, y, t) = 0\}$ は, $t < T_0$ において Hausdorff 距離の意味で平均曲率流方程式の解に収束するのであった [1]. そこで, h と ε を変化させた際に, 数値解のレベルセット $\Gamma_h^\varepsilon(t) = \{(x, y) \in (0, 1)^2 \mid u_h^\varepsilon(x, y, t) = 0\}$ が空集合になる時刻を T_h^ε 計算し, それが厳密解の爆発時刻 $T_0 = 0.02$ からどの程度ずれているのか, という点を観察する.

その結果をプロットしたものが図 3 である. ただし, メッシュが粗すぎて数値解がほとんど変化しなかった場合には, $T_h^\varepsilon = 0$ となっている. 線で結んでいるものは, ε を固定して, h を変化させた場合の結果である. 各 ε に対して, $1 \leq h/\varepsilon \leq 2$ のときは, h が小さくなるにつれて時刻の誤差も小さくなっている. しかしながら, h/ε が 1 を下回ると, あまり誤差が減衰していないことが観察される. これは, Allen-Cahn 方程式の時点で平均曲率流方程式の近似となっているため, いくら h が小さくても, ε が大きいままでは, 平均曲率流に収束しないからである. この結果が示唆することは, 界面運動のシミュレーションをフェーズフィールド法で行う場合は, メッシュサイズを小さく取りすぎても効果が上がらない, ということである. さらに, 何かしらの閾値が存在することも示唆している. この点を詳しく解析することは, 今後の研究課題である.

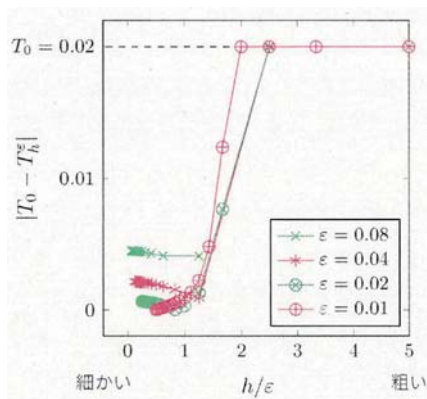


図3 数値的な“爆発時刻” T_h の挙動.

謝辞

本研究は、文部科学省博士課程教育リーディングプログラム (数物フロンティア・リーディング大学院)、および科研費 (No. 15J07471) の助成を受けたものである。

参考文献

- [1] G. Bellettini. *Lecture Notes on Mean Curvature Flow: Barriers and Singular Perturbations*. Pisa: Edizioni della Normale, 2013.
- [2] A. Braides. *Γ -convergence for beginners*. Oxford University Press, Oxford, 2002.
- [3] A. Braides and N. K. Yip. A quantitative description of mesh dependence for the discretization of singularly perturbed nonconvex problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 50(4):1883–1898, 2012.
- [4] X. Feng and A. Prohl. Numerical analysis of the Allen-Cahn equation and approximation for mean curvature flows. *Numer. Math.*, 94(1):33–65, 2003.
- [5] R. H. Nochetto and C. Verdi. Convergence past singularities for a fully discrete approximation of curvature-driven interfaces. *SIAM J. Numer. Anal.*, 34(2):490–512, 1997.
- [6] E. Sandier and S. Serfaty. Gamma-convergence of gradient flows with applications to Ginzburg-Landau. *Comm. Pure Appl. Math.*, 57(12):1627–1672, 2004.