

非線形問題の物理的性質を保存する差分スキームについて

東京大学工学部物理工学科 降旗 大介 (Daisuke Furihata)

1 はじめに

本研究の目的は、問題の持つ本質的性質をその離散近似系である差分スキームにおいて如何にして再現するかという問題に対して何らかの手がかりを与えることにある。つまり、問題を記述する微分方程式系が持つ性質を差分スキームにも反映させ、数値計算でも再現できるようにできないかということである。

もちろん、連続系で、つまり微分方程式で、定義されている問題のすべての性質が離散系である差分スキームでそのまま同時に再現されることは期待できない。しかし、全てではなくとも、問題の持つ性質のうちいくつかを選択し、それらを差分スキームで再現させることが可能ならば、これは十分に意味のあることだと考えられる。実際、そのような差分スキームの構成に関してはさまざまな議論がある (シンプレクティック解法など [5], [8], [4])。

本研究では、目的とする性質を具体的に示す式変形をそのまま離散系の式変形に対応させることで上記の目的を達せられるのではないかという考えのもとに、具体的にある方程式の差分スキームを構成してみせたものである。対象は、エネルギーが時間発展とともに減少する拡散系を記述する非線形偏微分方程式である Cahn-Hilliard 方程式である。離散化されたエネルギーが減少するようにという私信のもとに機械的に差分スキームを構成することができた。

この方法の利点は、差分スキームが保つべき性質をその差分スキームの構成時に事前に決定でき、しかもその実現が容易であり、構成方法が機械的であることである。

また、通常用いられる前進、後退、中心差分等、理論的解析は行いやすいがあまり実用的でない差分ではなく、実際に数値計算の現場で経験的に用いられる特殊な差分による構成を行なったため、本研究で得られた差分スキームは実用度が高いものとなっている。

2 本方法の大まかな指針

問題の性質を保ったまま系を離散化するには以下のような流れで全体を離散化すればよいというのが本研究の指針である。

- (A). その性質を示す (不) 等式を、その導出・変形仮定をなるべく細かくまで記したものと表現する。
- (B). その変形過程を変形の順序にしたがって離散化してゆく。
- (C). 対象となっている (不) 等式が全部離散化されたならば、それまでの必要条件を満たす範囲で差分スキームを作成すれば良い。

実際には、式変形を離散化してゆく途中で肝心の方程式の離散化された形も要求されることが多いため、対象とする(不)等式が全て離散化されればその時点で目的は達せられる。

この指針はそれほど目新しいものではない。自然であり分かりやすいことと、目的の性質を保存するためには何が必要なのかがはっきり分かることから、誰もが試みるものである。しかし、変形過程が複雑な場合、離散計算が大変で見通しが非常に悪くなったりして計算そのものができなくなってしまうことが多く、実際にこの指針にのっとって方程式の離散化を実現することは容易ではなかった。そこで、本研究では離散計算を極力単純で見通しの良いものにするこゝでこの難点をのりこえることにしたものである。

2.1 もっとも簡単な具体的例

本研究の指針に従うような簡単な例を示す。例えば、波動方程式 $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial x}, x \in [a, b]$ を周期的境界条件 $u(a) = u(b)$ のもとで解くと、

$$\text{保存則: } \quad \frac{\partial}{\partial t} \int_a^b u(x) dx = 0 \quad (2.1)$$

が成立する。

この保存則を差分スキームでも実現するには以下のように本研究の指針に従えば良い。

(A). 保存則を示す等式(2.1)の細かい変形過程を示す。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_a^b u dx &= \int_a^b \frac{\partial u}{\partial t} dx \\ &= \int_a^b \frac{\partial u}{\partial x} dx \\ &= [u]_a^b \\ &= u(b) - u(a) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.2)$$

(B). この変形過程を上から順に離散化してゆく。実際には、上の式を眺めながら

(a) $\int_a^b dx$ と $\frac{\partial}{\partial t}$ とを離散化することで最初の項を定義する。

(b) 演算の順序(空間方向への和と時間方向への差)を交換して、最初の変形を行なう。

(c) 差分スキーム

$$\frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta t} = \frac{U_{k+1}^{(n)} - U_k^{(n)}}{\Delta x} \quad (2.3)$$

を定義することで時間差分を空間差分に置き換える。

(d) 離散和分(積分の離散化されたもの)を行なう。

(e) 離散化された周期的境界条件

$$U_{N+1}^{(n)} = U_0^{(n)} \quad (2.4)$$

を要求することで、最終的に 0 に等価であることを得る。

として、以下のようになる。なお、 $U_k^{(n)}$ は $u(k\Delta x, n\Delta t)$ の近似量であり、 $N \equiv \frac{b-a}{\Delta x}$ である。

$$\begin{aligned} \frac{\sum_{k=0}^N U_k^{(n+1)} \Delta x - \sum_{k=0}^N U_k^{(n)} \Delta x}{\Delta t} &= \sum_{k=0}^N \left\{ \frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta t} \right\} \Delta x \\ &= \sum_{k=0}^N \left\{ \frac{U_{k+1}^{(n)} - U_k^{(n)}}{\Delta x} \right\} \Delta x \\ &= U_{N+1}^{(n)} - U_0^{(n)} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.5)$$

(C). 変形過程を全て離散化するまでに定義された離散化を満足する差分スキームを作れば良いが、この場合は途中でスキーム自体が定義されているためそれを利用すれば良い。つまり、差分スキーム (2.3) を周期的境界条件 (2.4) のもとで適用すれば、保存則

$$\sum_{k=0}^N U_k^{(n)} \Delta x = \text{Const.} \quad (2.6)$$

が成立することが保証されるのである。

ただし、この例は離散演算が容易であるからこのように簡単に結果が得られるのであり、一般にはこのように容易には結果は得られない。そこで、前章でも記したように離散演算をきちんと整理する必要性が生じてくる。離散演算を整理した結果については次章以降で詳しく述べている。

3 微分、積分の離散化

本研究ではとりあえず空間を 1 次元とする。さて、本研究の最終目的は完成した差分スキームが実用になることであるから、差分も実用性を重視して定義する。そこで、以下の条件を課す新しい差分作用素を導入する。

(A). 対称性を保つ

(B). n 次差分は $n+1$ 個の点の値を参照することによって得られる

(C). 微分近似として (A), (B) の条件の下で最良の精度を持つ

ただし、これらの条件には、番号の若い順に優先順位がつけられているものとする。なお、離散化幅は一定とする。これらの条件は、差分法を用いる際、暗黙のうちに仮定されていることが多く、それを明文化したものと見ることが出来る。

この条件を満たす差分は一意に求まり、次のように表現される。 n 次差分作用素を δ_n と書くと、次のようになる。

$$\delta_n \equiv |\tilde{D}^n| \quad (3.1)$$

ただし、

$$\tilde{D} \equiv \begin{pmatrix} \delta_+ \\ \delta_- \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

とし、このような二つの成分を持つ量の間に次のような積

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} ad \\ bc \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

を定義して $\tilde{D}^n$ を定義する。この積に対して、交換則、分配則が成立しないことには注意が必要である。和、差演算は普通に成分同士に対して演算を施せば良いものとする。

そして、この量をスカラー量に直す操作を以下のように定義する。

$$\left| \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \right| \equiv \frac{1}{2}(a + b) \quad (3.4)$$

$$\text{なお、} \delta_+ \equiv \frac{1}{\Delta x}(s_+ - 1), \quad \delta_- \equiv \frac{1}{\Delta x}(1 - s_-), \quad s_+ \equiv \exp(\Delta x \frac{\partial}{\partial x}), \quad s_- \equiv s_+^{-1} \quad (3.5)$$

である。このとき、 Δx は差分における離散化幅である。 $s_{\pm}$ はシフト作用素であり、 δ_+ 、 δ_- は各々前進、後退差分作用素である。

この新しい差分作用素 δ_n は、これまでも現場では各々の次数に応じて具体的な形で用いられることはあったが [1]、このように指針に従って統一的に導出されたものではなかった。

差分演算子をこのように定義したことで種々の演算が機械的にできるようになり、離散計算を単純で見通しの良いものにするという本研究の目的の一つが達せられることになる。

また、差分の逆演算に相当する和分を以下のように定義する。

$$S_{k=0}^N f(a + k\Delta x)\Delta x \equiv \sum_{k=0}^N \gamma_k f(a + k\Delta x)\Delta x \quad (3.6)$$

$$\text{ただし、} \quad b \equiv a + N\Delta x, \quad N \in \mathcal{N}, \quad \gamma_k \equiv \begin{cases} \frac{1}{2} & : k = 0 \text{ or } k = N \\ 1 & : \text{otherwise} \end{cases}$$

であるとする。これは一見して分かるように、台形則そのものである。なお、和分も差分のように本来は行列表現を持つものであるが、本論文では省略する。

4 差分、和分の演算則

3章で示した作用素に対して、成立する演算則は多いが、本論文で使用するもの、すなわち、部分積分を離散化したものに相当する演算則だけに限定してここに示す。

$\tilde{f}, \tilde{g}$ を 2 成分を持つ量とすると、

$$S_{k=0}^N(\tilde{f}\tilde{D}\tilde{g})\Delta x + S_{k=0}^N(\tilde{g}\tilde{D}^\dagger\tilde{f})\Delta x = \frac{1}{2} [\tilde{f}\tilde{A}\tilde{g} + \tilde{g}\tilde{A}^\dagger\tilde{f}]_{k=0}^N \quad (4.1)$$

が成り立つ。

$$\text{ただし、} \quad \tilde{A} \equiv \begin{pmatrix} s_+ \\ s_- \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

部分和分の式は本論文で離散的な変分の計算を可能にするという意味で非常に重要な式である。

5 Cahn-Hilliard 方程式について

本論文で差分スキームを実際に構成してみせる対象の方程式である Cahn-Hilliard 方程式は、非線形拡散型方程式である [2]。

この方程式の詳細については省略するが、おおまかに性質を述べると、非線形性が非常に強く、安易な数値計算をすると発散してしまうことから数値解を求めること自体が困難な偏微分方程式の一つとしてよく知られているものである。

なお、この方程式に関しては我々は以前に異なる方法で数値解を求めているため [6],[7]、およそ解の性質もわかっており、求められた数値解が信用できるものかどうか判断できる。

具体的には、Cahn-Hilliard 方程式は、

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} (pu + ru^3 + q \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}) \quad (5.1)$$

であり、これは局所エネルギー G を

$$G = \frac{1}{2}pu^2 + \frac{1}{4}ru^4 - \frac{1}{2}q(\frac{\partial u}{\partial x})^2 \quad (5.2)$$

とすることにより、

$$\text{拡散型方程式：} \quad \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{\delta G}{\delta u} \quad (5.3)$$

として扱える。

この方程式に対する境界条件は

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta G}{\delta u} = 0 \quad \text{on } \partial\Omega \quad (5.4)$$

である。

この境界条件のため、Cahn-Hilliard 方程式は以下の二つの性質を持つ。

$$[\text{組成保存}] \quad \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} u dx = 0 \quad (5.5)$$

$$[\text{エネルギー減少}] \quad \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} G dx \leq 0 \quad (5.6)$$

数値計算の安定性からいえば、上の二つの性質の両方か、もしくは、エネルギーの減少だけでも差分スキームによって再現されることが非常に大きな意味を持つ。

6 Cahn-Hilliard 方程式の差分スキームの構成

Cahn-Hilliard 方程式に対しては、「エネルギー減少」という性質を再現する差分スキームを構成してみることにする。これは、問題の物理的性質からいって、エネルギーが減少すれば系が安定な定常状態へ近付くことを意味するため、数値的にも安定な差分スキームが得られるだろうという予想によるものである。(この予想が正しいことは、理論的に証明され、数値実験を通して確認されたが、詳細は省略する。)

もちろん、この際には本研究で得られている差分を用いることで、離散演算を簡便に行なう。

以下、2.1章で行なったことと全く同様にして「エネルギー減少」という性質を離散化してゆく。

(A). Cahn-Hilliard 方程式のエネルギー減少性 (5.6) は以下のように示される。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_a^b G dx &= \int_a^b \frac{\partial G}{\partial t} dx \\ &= \int_a^b \frac{\delta G}{\delta u} \frac{\partial u}{\partial t} dx \\ &= \int_a^b \frac{\delta G}{\delta u} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{\delta G}{\delta u} \right) dx \\ &= \left[\frac{\delta G}{\delta u} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\delta G}{\delta u} \right) \right]_a^b - \int_a^b \left| \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\delta G}{\delta u} \right) \right|^2 dx \\ &= - \int_a^b \left| \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\delta G}{\delta u} \right) \right|^2 dx \\ &\leq 0 \end{aligned} \quad (6.1)$$

ただし、 $\Omega = [a, b]$ とする。

(B). 上の変形過程を次のような順序で離散化する。

(a) 局所エネルギー G を

$$G_d(U_k^{(n)}) \equiv \frac{1}{2}p(U_k^{(n)})^2 + \frac{1}{4}r(U_k^{(n)})^4 - \frac{1}{2}q \left\{ \frac{\left(\frac{U_{k+1}^{(n)} - U_k^{(n)}}{\Delta x} \right)^2 + \left(\frac{U_k^{(n)} - U_{k-1}^{(n)}}{\Delta x} \right)^2}{2} \right\} \quad (6.2)$$

と離散化して、積分を和分に置き換えて全エネルギーを離散化し、あとは時間について差をとって最初の式を得る。

(b) 計算の順序を交換して、最初の変形を行なう。

(c) 具体的に各項を部分積分 (部分積分を離散化したもの。(4.1) のこと。) をし、次の変形を行なう。これにより、 G_d の変分に相当する量

$$H_k^{(n)} \equiv \frac{\left\{ \frac{1}{2}p(U_k^{(n+1)})^2 + \frac{1}{4}r(U_k^{(n+1)})^4 \right\} - \left\{ \frac{1}{2}p(U_k^{(n)})^2 + \frac{1}{4}r(U_k^{(n)})^4 \right\}}{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}} + q\delta_2 \left(\frac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2} \right) \quad (6.3)$$

を得る。なお、この式変形の際に境界項として

$$F_k^{(n)} \equiv -\frac{1}{2}q \left\{ (s_1 U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)})\delta_1 U_k^{(n+1)} - (s_1 U_k^{(n)} - U_k^{(n+1)})\delta_1 U_k^{(n)} \right\} \quad (6.4)$$

が出てくるため、離散化された境界条件として

$$\delta_1 U_k^{(n)} = 0 \quad (k=0 \text{ or } k=N) \quad (6.5)$$

を要求することでこの項を消去する。なお、

$$s_1 \equiv \frac{s_+ + s_-}{2} \quad (6.6)$$

である。

(d) 差分スキーム

$$\frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta t} = \delta_2 H_k^{(n)} \quad (6.7)$$

を定義することで時間差分と空間差分を置き換え、変形を行なう。連続な式の変形をみれば、このように差分スキームをおくのがこの場合はもっとも自然であると考えられる。

(e) 部分積分 (4.1) を適用して変形を行なう。

(f) 離散化された境界条件としてさらに

$$\delta_1 H_k^{(n)} = 0 \quad (k=0 \text{ or } k=N) \quad (6.8)$$

を要求することで境界項を消去し、最終的な不等式を得る。

として、結局以下のような離散変形式を得る。

$$\begin{aligned}
& \frac{S_{k=0}^N G_d(U_k^{(n+1)}) \Delta x - S_{k=0}^N G_d(U_k^{(n)}) \Delta x}{\Delta t} \\
&= S_{k=0}^N \left(\frac{G_d(U_k^{(n+1)}) - G_d(U_k^{(n)})}{\Delta t} \right) \Delta x \\
&= S_{k=0}^N \left(H_k^{(n)} \cdot \frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta t} \right) \Delta x + [F_k^{(n)}]_{k=0}^N \\
&= S_{k=0}^N \left(H_k^{(n)} \cdot \frac{H_{k-1}^{(n)} - 2H_k^{(n)} + H_{k+1}^{(n)}}{\Delta x^2} \right) \Delta x \\
&= \left[(s_1 H_k^{(n)}) (\delta_1 H_k^{(n)}) \right]_{k=0}^N - S_{k=0}^N \left\{ \frac{(\delta_+ H_k^{(n)})^2 + (\delta_- H_k^{(n)})^2}{2} \right\} \Delta x \\
&= -S_{k=0}^N \left\{ \frac{(\delta_+ H_k^{(n)})^2 + (\delta_- H_k^{(n)})^2}{2} \right\} \Delta x \\
&\leq 0
\end{aligned} \tag{6.9}$$

(C). この場合も途中で差分スキームそのものを定義してしまっているのでそれを用いれば良い。つまり、差分スキーム (6.7) を境界条件 (6.5), (6.8) のもとで適用すれば、エネルギーの減少

$$S_{k=0}^N G_d(U_k^{(n+1)}) \Delta x - S_{k=0}^N G_d(U_k^{(n)}) \Delta x \leq 0 \tag{6.10}$$

が保証されるのである。

なお、この場合は一種の偶然になるが、組成保存 (5.5) もまたこの差分スキームによって満たされる。これは、

$$\begin{aligned}
\frac{S_{k=0}^N U_k^{(n+1)} \Delta x - S_{k=0}^N U_k^{(n)} \Delta x}{\Delta t} &= S_{k=0}^N \left(\frac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta t} \right) \Delta x \\
&= S_{k=0}^N (\delta_2 H_k^{(n)}) \Delta x \\
&= [\delta_1 H_k^{(n)}]_{k=0}^N \\
&= 0
\end{aligned} \tag{6.11}$$

として示される。

偶然とはいえ組成保存まで満たされてしまうことは、この差分スキームの構成方法の整合性が高いことを示唆している。

紙面の都合上、本論文には詳細な式変形は示さずに結果のみを示しているため、ややもすると分かりにくい表現があるが、これらは3章の記号を用いて表現すると非常に分かりやすいものとなることを指摘しておく。

7 まとめおよび今後の課題

問題がもつ性質の一つに着目し、それを差分スキームにおいても再現するための方法論を述べ、その方法が実現可能なものであることを Cahn-Hilliard 方程式の「エネルギーが時間発展にともない減少する」差分スキームを実際に構成してみせることで示した。

この際、離散演算を統一的に扱うために差分作用素、和分作用素をきちんと整理したために計算の見通しが非常に良くなっている。また、用いた差分作用素は実用性を第一に考慮しているものであるから、構成された差分スキームはそのまま数値計算の使用に耐えるものであると考える。

本方法論の欠点としては、微分方程式の理論的な離散化を我々の物理的指針に従って忠実にやっているため、差分スキームは時間方向に対して対称になり、結果として陰的なものとなることがあげられる。

しかし、実際は本方法論で構成される差分スキームは数値的安定性が高いと期待できるため、通常用いられる陽的な差分スキームに比べて時間離散幅を大きくとることができ、計算量の点ではけして不利ではない。例えば、今回構成した Cahn-Hilliard 方程式の差分スキームは、任意の時間離散幅に対して数値的に安定であることが証明されており、他の差分スキームに比べて大きな優位性を誇っている。

現在、本方法論の一部の対称性を崩すことで構成される差分スキームを陽的なものにできないか検討中である。もし可能ならば、安定な上に陽的な差分スキームが構成できる可能性があり、実用性の点からいって非常に意味が大きいと思われるからである。

参考文献

- [1] William F. Ames. 工学における非線形偏微分方程式 I 下, 数理解析とその周辺, 第 24 巻. 産業図書, 東京都千代田区外神田 1-4-21, 第 2 版, 1979.
- [2] J. W. Cahn and J. E. Hilliard. Free energy of a non-uniform system. I. Interfacial free energy. *J.Chem.Phys.*, Vol.28, pp.258-267, 1958.
- [3] Ryogo Hirota. Difference analogue of nonlinear evolution equations in Hamiltonian form. *RIMS*, Vol.472, pp.128-135, Nov. 1982.
- [4] Ryogo Hirota. Difference analogues of nonlinear evolution equations in hamiltonian form. Technical Report A-12, Dep. of Applied Physics, Fact. of Engineering, Hiroshima Univ., Higashi-Hiroshima, Aug. 1982.
- [5] 吉田春男. ハミルトン力学系のためのシンプレクティック数値解法. 日本応用数理学会平成 5 年度年会講演予稿集, pp.55-56. 日本応用数理学会, Sep. 1993.
- [6] 降旗大介. スピノーダル分解の数値解析的研究. Master's thesis, 東京大学工学部物理工学科, 文京区本郷 7-3-1, Feb. 1992.

- [7] 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法. 応用数理学会平成3年度年会口頭発表, Oct. 1991.
- [8] 石森勇次. 4次の非線形力学系に対するエネルギーの保存する陽的差分法. 日本応用数理学会論文誌, Vol.3, No.3, pp.177-197, 1993.