A structure-preserving numerical method for partial difference equations via a new formulation of the discrete variational derivative method

A structure-preserving numerical method for partial difference equations via a new formulation of the discrete variational derivative method

金沢大学自然科学研究科数物科学専攻:松岡光

20140110

概要

In this thesis, we study a numerical method for nonlinear partial differential equations and their systems with variational structure such as energy conservation or dissipation property. The discrete variational derivative method has been widely used to obtain some special numerical schemes that have the same conservation/dissipation properties in a discrete sense. Such schemes give qualitatively better numerical solutions, however, a lengthy and complicated discrete calculus is generally required in deriving the schemes. Using a suitable discrete L^2 inner product and fractional powers of a discrete approximation of the Laplace operator, we give a new mathematical formulation of the discrete variational derivative method and simplify not only the derivation of conservative/dissipative numerical schemes but also analysis and error estimates of the schemes. We apply this new approach to a Cahn-Hilliard type equation with long-range interaction and obtain a finite difference scheme that has the same characteristic properties, mass conservation and energy dissipation, as the original equation does. We also discuss the stability and convergence of the proposed scheme. Our new approach can be applied to various types of nonlinear partial differential equations including a FitzHugh-Nagumo type equation and the Korteweg-de Vries equation.

1 要旨

質量，エネルギー，確率などの物理量が保存あるいは散逸するという微分方程式が有する構造を数値解法に取り込む手法は,「構造保存型数値解法」として盛んに研究されている。とりわけ近年は，有限体積法, 離散変分法, Finite element exterior calculus (FEEC) 法等によって, 偏微分方程式を計算する際にもとの方程式系の重要な性質を保つ数値解法の構築に成功している．その中でも 1990 年代に降旗一森によって開発された「離散変分法」は，偏微分方程式を直接的に扱える手法として盛んに研究が行われ，幅広いクラスの偏微分方程式に適用されている。従来の離散変分法では，系の自由エネルギー等の汎関数微分を用いて表される偏微分方程式に対し，その汎関数微分の計算を離散の枠組みで模することにより汎関数微分の離散化 (離散変分導関数) を行い，それを用いて差分スキームを構築する。しかし，離散変分導関数の計算のためには,

(i) 積分の離散化 (和分)
(ii) 境界条件の離散化
(iii) エネルギー汎関数に含まれる微分項の離散化

を適切に設定し，これらの離散化方法に合う部分和分公式を用いて整合させる必要があり，方程式ごとに異なる計算が必要になるなど見通しが悪く，また離散問題と連続問題の表面的な対応が数学的に説明しづらいという側面があった。

本論文では, 上記 (i)-(iii) を,

(i) 連続問題における L^2 内積の離散化
(ii) ラプラス作用素の離散化行列の構成
(iii) (ii) の離散化行列の分数べきを用いた表現

ととらえることで，離散変分法の新たな数学的定式化を行った。

定義 1. 任意の $N+1$ 次元ベクトル $\mathbf{U} = (U_0, \ldots, U_N)^\mathsf{T}, \mathbf{V} = (V_0, \ldots, V_N)^\mathsf{T} \in \mathbb{R}^{N+1}$ *($N \in \mathbb{N}$)* に対

して, 以下の内積を定義する．ただし, $\triangle x$ は正の定数とする．

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{U}, \mathbf{V} \rangle &= \sum_{k=0}^{N}{}'' U_k V_k \triangle x \\ &= \frac{1}{2} U_0 \cdot V_0 \triangle x + \sum_{k=1}^{N-1} U_k \cdot V_k \triangle x + \frac{1}{2} U_N \cdot V_N \triangle x\end{aligned}$$

これは, 台形則を利用した通常の L^2 内積の離散化である．さらに, 2 階の中心差分作用素 $\delta^{(2)}$ を行列で表現し, (-1) をかけたものを A とする．すなわち,

$$A = \frac{1}{(\triangle x)^2} \begin{pmatrix} 2 & -2 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & 2 & 1 \\ & & & & -2 & 2 \end{pmatrix}.$$

ただし, 斉次ノイマン境界条件を中心差分を用いて離散化したものを取り込んでいることに注意する．A の形より, A は通常の意味では対称行列ではないが, 以下のように定義 1 で定めた離散 L^2 内積に関しては対称であることがわかる．すわなち, $N+1$ 次元ベクトル $\mathbf{U}, \mathbf{V}$ に対して以下が成立する：

補題 2.

$$\langle A\mathbf{U}, \mathbf{V} \rangle = \langle \mathbf{U}, A\mathbf{V} \rangle.$$

行列 A の対称性から, A の固有ベクトル Φ_k $(k = 0, \ldots, N,\ \langle \Phi_k, \Phi_k \rangle = 1)$ が $\mathbb{R}^{N+1}$ の正規直交基底となることがわかる．A は固有値 0 を持つので逆行列を持たないが, 以下の条件の下で A の “逆作用素” が定義できることがわかる．

補題 3. 方程式 $A\mathbf{U} = \mathbf{V} \quad (\mathbf{U}, \mathbf{V} \in \mathbf{R}^{N+1})$ が解を持つ必要十分条件は, $\langle \mathbf{V}, \mathbf{1} \rangle = 0$ である ($\mathbf{1} \in \mathcal{R}^{N+1}$ は成分が全て 1 のベクトルとする）．

すなわち A は,

$$M_0 = \{\mathbf{U} \in \mathbf{R}^{N+1} \mid \langle \mathbf{U}, \Phi_0 \rangle = 0\}.$$

上で全単射となる (Φ_0 は $\mathbf{1}$ の定数倍であることに注意)．したがって, $A_0 = A|_{M_0}$ とおくと, A および A_0 の分数べき A^α, $A_0^{-\alpha}$ $(\alpha > 0)$ が行列 A のスペクトル分解を用いて定義される．

上記の準備の下で, 以下の非局所項を持つ Cahn-Hilliard タイプの方程式:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(W'(u) - \varepsilon^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right) - \sigma(u - \overline{u}),$$

に離散変分法を適用する．ただし, $W(u) = (u^2-1)^2/4$ は 2 重井戸型ポテンシャル関数, ε は正の微小なパラメーター, $\sigma > 0$, $\overline{u} = \frac{1}{|\Omega|}\int_\Omega u(x,t)dx$ とし, 境界では斉次ノイマン条件を課すものとする．この方程式は, 通常の Cahn-Hilliard 方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(W'(u) - \varepsilon^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)$$

に比べると, 線形項が加わっただけではあるが, $\overline{u}$ という u の平均の項が重要な意味を持つ．すなわち計算スキームによる数値解の質量 $\displaystyle\int_\Omega u(x,t)dx$ が保存されていれば, 平均も一定となるのだが, 質量が保

存されていないと数値計算上大きな誤差が生じてしまうことになる．この方程式に対して, 離散変分導関数を内積で表記する事によって, 導く.

公式 4. 任意の $N+1$ 次元ベクトル $\mathbf{U}, \mathbf{V}$ に対して, 離散全エネルギー J_d の離散変分導関数 $\dfrac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}, \mathbf{V})}$: $\mathbf{R}^{N+1} \times \mathbf{R}^{N+1} \to \mathbf{R}^{N+1}$ は, 以下を満たす.

$$J_d(\mathbf{U}) - J_d(\mathbf{V}) = \langle \frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}, \mathbf{V})}, \mathbf{U} - \mathbf{V} \rangle.$$

そして, 離散全エネルギー $J_d(\mathbf{U})$ は以下で定義する (各ベクトルの演算は成分ごとの演算とする):

$$J_d(\mathbf{U}) = \sum_{k=0}^{N}{}'' \frac{\varepsilon^2}{2}(A^{1/2}\mathbf{U})^2 + W_d(\mathbf{U}) + \frac{\sigma}{2} A_0^{-\frac{1}{2}} \left(\mathbf{U} - \overline{\mathbf{U}}\right)^2.$$

ここで $W_d(\mathbf{U}) = \dfrac{1}{4}(\mathbf{U}^2 - 1)^2$ とする．この離散変分導関数を用いて, 以下の差分スキームを導くことができる:

$$\frac{\mathbf{U}^{(m+1)} - \mathbf{U}^{(m)}}{\triangle t} = -A \frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}^{(m+1)}, \mathbf{U}^{(m)})}$$

$$\frac{\delta J_d}{\delta(\mathbf{U}, \mathbf{V})} = \varepsilon^2 A \left(\frac{\mathbf{U} + \mathbf{V}}{2}\right) + \frac{\mathbf{U}^3 + \mathbf{U}^2\mathbf{V} + \mathbf{U}\mathbf{V}^2 + \mathbf{V}^3}{4} - \frac{\mathbf{U} + \mathbf{V}}{2} + \sigma A_0^{-1} \left(\frac{\mathbf{U} + \mathbf{V}}{2} - \frac{\overline{\mathbf{U}} + \overline{\mathbf{V}}}{2}\right).$$

実際にこれは, 導入した内積での離散変分導関数の式を満たす．このスキームの数値例を以下に示す. Figure 1, Figure 2 はそれぞれ, 通常の陽解法 (Explicit), 離散変分法 (DVDM) による数値計算の時間発展を示した図であるが, 離散変分法による計算がうまくいっていることがわかる．Figure 3, 4 はそれぞれ, 両者のエネルギー, 質量の時間変化を描いたものであるが, エネルギーは確かに両方とも減っていることがわかるが, 質量については, 陽解法のケースが保存していないことがわかる.

新しい定式化を用いた離散変分法による差分スキームについては, その一意可解性, 安定性の証明のみならず, 誤差評価もベクトルと行列の演算を用いて従来の方法よりも容易に行える。さらに, 熱方程式や KdV 方程式などの従来の離散変分法が適用されてきた問題のみならず, FitzHugh-Nagumo タイプの反応拡散方程式系に対しても有効であることを確認することができた.

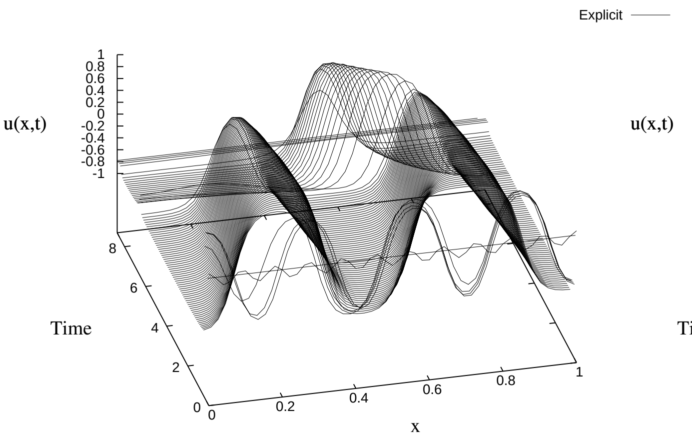

Figure1　陽解法による数値解

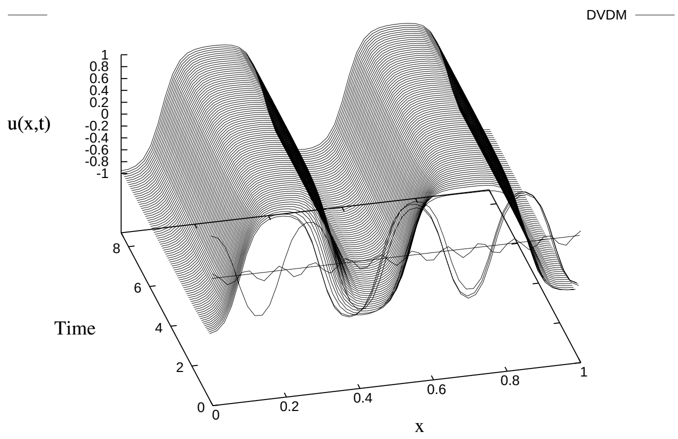

Figure2　離散変分法による数値解

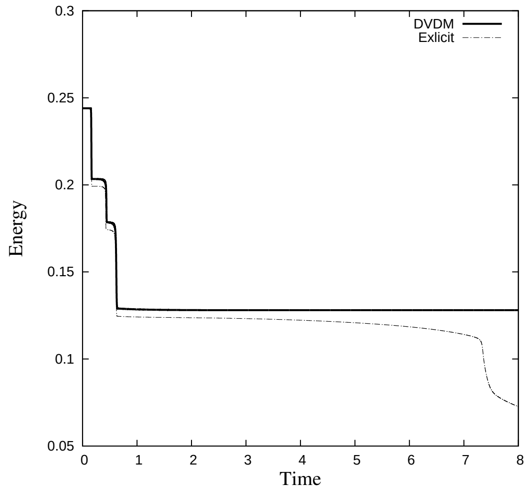

Figure3　エネルギーの時間変化

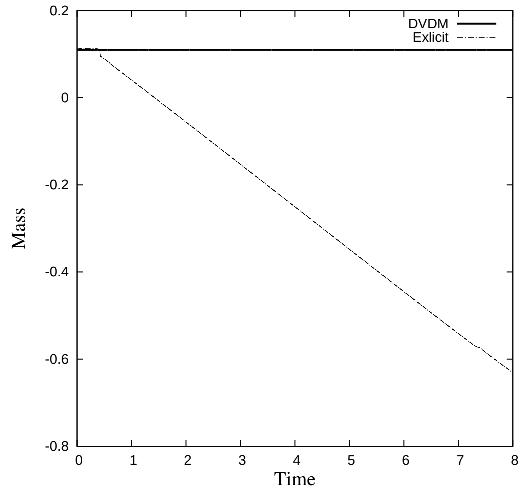

Figure4　質量の時間変化

学位論文審査報告書（甲）

1．学位論文題目（外国語の場合は和訳を付けること。）

離散変分法の新しい定式化による偏微分方程式の構造保存型数値解法

2．論文提出者　(1) 所　属　数物科学　専攻　数学　講座

(2) 氏　名　松岡　光（まつおか　ひかる）

3．審査結果　(1) 判　定（いずれかに○印）　合　格　・　不合格

(2) 授与学位　博　士（　理学　）

4．学位論文審査委員

5．審査結果の要旨（600～650字）

本博士論文は，質量保存性やエネルギー保存性・散逸性などの変分的構造を持つ偏微分方程式に対する数値解析手法である「離散変分法」に対し，適切な内積の導入とラプラス作用素を離散化して得られる行列の分数べきの利用による新しい数学的定式化を行い，その有用性を明らかにしたものである。離散変分法は，偏微分方程式の変分的構造を数値解法に取り込む手法として幅広いクラスの偏微分方程式に有用な解法として認められている。しかし，その鍵となる離散変分導関数の計算のためには，エネルギーの離散化，境界条件の離散化，積分の離散化の各方法を適切に設定した上で，さらに適切な部分和分公式が必要になるなど，計算の見通しが悪く，連続問題との対応が分かりにくいという欠点があった。本論文では，和分の取り方を連続問題における L^2 内積の離散化ととらえ，境界条件をラプラス作用素の離散化行列に取り込み，さらにその行列の分数べきを用いてエネルギー汎関数を離散化することで，部分和分公式を経由することなくベクトルや行列の演算のみで離散変分導関数を計算するという新たな手法を開発した。また，この新しい手法をFitzHugh-Nagumo型方程式や非局所エネルギーを持つCahn-Hilliard型方程式に適用し，もとの方程式が持つ質量保存性とエネルギー散逸性を有する差分スキームを構築し，一意可解性，安定性の証明や誤差評価を行うなど，その有用性も確認した。以上により，平成26年1月30日に開催された公聴会および引き続き行われた審査会において，本論文は博士（理学）の学位を授与するにふさわしいと判断した。